

University of Groningen

Activation of ethers and sulfides by organolanthanide hydrides - molecular-structures of (cp-asterisk(2)y)(2)(mu-och(2)ch(2)O)(thf)(2) and (cp-asterisk-ce-2)(2)(mu-o)(thf)(2)

Deelman, B.J.; Booij, M.; Meetsma, A.; Teuben, J.H.; Kooijman, H.; Spek, A.L.

Published in:
Organometallics

DOI:
[10.1021/om00005a032](https://doi.org/10.1021/om00005a032)

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version
Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:
1995

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Deelman, B. J., Booij, M., Meetsma, A., Teuben, J. H., Kooijman, H., & Spek, A. L. (1995). Activation of ethers and sulfides by organolanthanide hydrides - molecular-structures of (cp-asterisk(2)y)(2)(mu-och(2)ch(2)O)(thf)(2) and (cp-asterisk-ce-2)(2)(mu-o)(thf)(2). *Organometallics*, 14(5), 2306-2317. <https://doi.org/10.1021/om00005a032>

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

L2317-m1

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Crystal Data		C216 H352 O20 Y8	
Empirical Formula		3980.40	
Formula Weight			
Crystal System		Orthorhombic	
Space group	Pbcn	(No. 60)	
a, b, c [Angstrom]	21.7483(12)	14.2806(12)	16.726(2)
alpha, beta, gamma [deg]	90	90	90
V [Ang**3]		5194.7(8)	
Z		1	
D(calc) [g/cm**3]		1.272	
F(000) [Electrons]		2120	
Mu(MoKa) [/cm]		22.7	
Crystal Size [mm]	0.5 x 0.5 x 0.5		
Data Collection			
Temperature (K)		150	
Radiation [Angstrom]	MoKa (Graphite Monochromator)	0.71073	
Theta Min-Max [Deg]		0.94, 27.5	
Scan type		Omega / 2 Theta	
Scan, [Deg]		0.85 + 0.35 Tan(Theta)	
Hor. and vert. aperture [mm]		2.77 4.00	
Reference Reflection(s)		2 0 7, 5 2 1, 2 5 2	
Dataset		-25: 0 ; -16: 0 ; -19: 19	
Tot., Uniq. Data, R(int)		8947, 4163, 0.08	
Refinement			
Npar		332	
wR2, R1, S	0.144, 0.063 (for 2200 F(o)>4sigma(F(o))), 0.995		
w**1	sigma**2(F**2) + (0.0488P)**2		
Max. and Av. Shift/Error	-0.123, 0.005		
Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.39, 0.43		

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
Y(1)	0.12314(3)	0.19694(4)	0.09224(3)	0.0292(2)
O(1)	0.0524(2)	0.1611(3)	0.1665(2)	0.0333(17)
O(2)	0.1425(2)	0.3325(3)	0.1730(3)	0.0440(17)
C(1)	0.1674(3)	0.0360(5)	0.1477(4)	0.031(2)
C(2)	0.1964(3)	0.1043(5)	0.1918(4)	0.043(3)
C(3)	0.2384(3)	0.1525(5)	0.1413(5)	0.047(3)
C(4)	0.2337(3)	0.1127(5)	0.0662(4)	0.044(3)
C(5)	0.1903(3)	0.0404(5)	0.0687(4)	0.035(3)
C(6)	0.1233(4)	-0.0336(5)	0.1781(5)	0.067(3)
C(7)	0.1864(4)	0.1221(7)	0.2794(4)	0.085(4)
C(8)	0.2850(4)	0.2227(6)	0.1692(8)	0.116(6)
C(9)	0.2798(4)	0.1345(6)	-0.0006(6)	0.089(4)
C(10)	0.1754(5)	-0.0290(5)	0.0049(5)	0.087(4)
*C(11A)	0.0257(7)	0.2328(12)	-0.0077(9)	0.062(7)
*C(11B)	0.1329(9)	0.2989(18)	-0.0404(13)	0.001(5)
*C(12A)	0.0622(11)	0.3158(13)	0.0037(10)	0.071(8)
*C(12B)	0.0966(16)	0.219(2)	-0.064(3)	0.09(2)
*C(13A)	0.1158(9)	0.3078(16)	-0.0386(13)	0.083(9)
*C(13B)	0.0450(12)	0.2149(19)	-0.0174(19)	0.021(8)
*C(14A)	0.1204(8)	0.2173(7)	-0.0678(6)	0.029(4)
*C(14B)	0.0356(9)	0.3028(16)	0.0162(16)	0.013(6)
*C(15A)	0.0654(5)	0.1766(7)	-0.0496(6)	0.033(4)
*C(15B)	0.0879(10)	0.3512(13)	0.0010(14)	0.019(7)
*C(16A)	-0.0349(6)	0.2179(16)	0.0188(8)	0.161(14)
*C(16B)	0.1839(11)	0.334(2)	-0.0841(17)	0.073(10)
*C(17A)	0.0391(12)	0.4077(13)	0.0417(12)	0.240(16)
*C(17B)	0.1117(16)	0.141(2)	-0.1249(19)	0.115(14)

L2317-m1

Table S1 - Crystal Data and Details of the Structure Determination
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Crystal Data		Data Collection	
Empirical Formula	C216 H352 O20 Y8	Temperature (K)	150
Formula Weight	3980.40	Radiation [Angstrom]	Moka (Graphite Monochromator) 0.71073
Crystal System	Orthorhombic	Theta Min-Max [Deg]	0.94, 27.5
Space group	Pbcn (No. 60)	Scan type	Omega / 2 Theta
a, b, c [Angstrom]	21.7483(12) 14.2806(12) 16.726(2)	Scan, [Deg]	0.85 + 0.35 Tan(Theta)
alpha, beta, gamma [deg]	90 90 90	Hor. and vert. aperture [mm]	2.77 4.00
V [Ang**3]	5194.7(8)	Reference Reflection(s)	2 0 7, 5 2 1, 2 5 2
Z	1	Dataset	-25: 0 ; -16: 0 ; -19: 19
D(calc) [g/cm**3]	1.272	Tot., Uniq. Data, R(int)	8947, 4163, 0.08
F(000) [Electrons]	2120	Refinement	
Mu(MoKa) [/cm]	22.7	Npar	332
Crystal Size [mm]	0.5 x 0.5 x 0.5	wR2, R1, S	0.144, 0.063 (for 2200 F(o)>4sigma(F(o))), 0.995
		w*-1	sigma**2(F**2) + (0.0488P)**2
		Max. and Av. Shift/Error	-0.123, 0.005
		Min. and Max. resd. dens. [e/Ang^3]	-0.39, 0.43

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal
Parameters of the non-Hydrogen atoms
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(eq) [Ang^2]
Y(1)	0.12314(3)	0.19694(4)	0.09224(3)	0.0292(2)
O(1)	0.0524(2)	0.1611(3)	0.1665(2)	0.0333(17)
O(2)	0.1425(2)	0.3325(3)	0.1730(3)	0.0440(17)
C(1)	0.1674(3)	0.0360(5)	0.1477(4)	0.031(2)
C(2)	0.1964(3)	0.1043(5)	0.1918(4)	0.043(3)
C(3)	0.2384(3)	0.1525(5)	0.1413(5)	0.047(3)
C(4)	0.2337(3)	0.1127(5)	0.0662(4)	0.044(3)
C(5)	0.1903(3)	0.0404(5)	0.0687(4)	0.035(3)
C(6)	0.1233(4)	-0.0336(5)	0.1781(5)	0.067(3)
C(7)	0.1864(4)	0.1221(7)	0.2794(4)	0.085(4)
C(8)	0.2850(4)	0.2227(6)	0.1692(8)	0.116(6)
C(9)	0.2798(4)	0.1345(6)	-0.0006(6)	0.089(4)
C(10)	0.1754(5)	-0.0290(5)	0.0049(5)	0.087(4)
*C(11A)	0.0257(7)	0.2328(12)	-0.0077(9)	0.062(7)
*C(11B)	0.1329(9)	0.2989(18)	-0.0404(13)	0.001(5)
*C(12A)	0.0622(11)	0.3158(13)	0.0037(10)	0.071(8)
*C(12B)	0.0966(16)	0.219(2)	-0.064(3)	0.09(2)
*C(13A)	0.1158(9)	0.3078(16)	-0.0386(13)	0.083(9)
*C(13B)	0.0450(12)	0.2149(19)	-0.0174(19)	0.021(8)
*C(14A)	0.1204(8)	0.2173(7)	-0.0678(6)	0.029(4)
*C(14B)	0.0356(9)	0.3028(16)	0.0162(16)	0.013(6)
*C(15A)	0.0654(5)	0.1766(7)	-0.0496(6)	0.033(4)
*C(15B)	0.0879(10)	0.3512(13)	0.0010(14)	0.019(7)
*C(16A)	-0.0349(6)	0.2179(16)	0.0188(8)	0.161(14)
*C(16B)	0.1839(11)	0.334(2)	-0.0841(17)	0.073(10)
*C(17A)	0.0391(12)	0.4077(13)	0.0417(12)	0.240(16)
*C(17B)	0.1117(16)	0.141(2)	-0.1249(19)	0.115(14)

L2317-m2

Table S2 - Final Coordinates and Equivalent Isotropic Thermal Parameters of the non-Hydrogen atoms (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(eq) [Ång ²]
*C(18A)	0.1689(9)	0.3797(11)	-0.0494(9)	0.130(9)
*C(18B)	-0.0067(13)	0.1411(18)	-0.0237(18)	0.083(10)
*C(19A)	0.1644(6)	0.1768(10)	-0.1286(6)	0.068(6)
*C(19B)	-0.0174(10)	0.3371(18)	0.0645(15)	0.057(8)
*C(20A)	0.0446(7)	0.0809(8)	-0.0821(7)	0.081(6)
*C(20B)	0.1007(10)	0.4527(13)	0.0258(13)	0.040(6)
C(21)	-0.0017(4)	0.1485(5)	0.2057(4)	0.049(3)
C(22)	0.1850(4)	0.4084(6)	0.1690(7)	0.095(5)
C(23)	0.1858(5)	0.4542(8)	0.2455(6)	0.117(6)
C(24)	0.1350(5)	0.4132(8)	0.2930(5)	0.106(5)
C(25)	0.1022(4)	0.3545(6)	0.2367(5)	0.069(3)
O(3)	0	0.5594(10)	1/4	0.293(15)
C(26)	0.0068(11)	0.6163(9)	0.1838(9)	0.242(15)
C(27)	0.0155(8)	0.7013(9)	0.2120(6)	0.157(8)

U(eq) = 1/3 of the trace of the orthogonalized U

Starred Atom sites have a Population less than 1.0

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(iso) [Ång ²]
H(61)	0.1452(4)	-0.0879(16)	0.196(3)	0.1010
H(62)	0.0955(16)	-0.051(3)	0.1361(10)	0.1010
H(63)	0.1004(17)	-0.0071(14)	0.222(2)	0.1010
H(71)	0.2190(17)	0.161(4)	0.2997(10)	0.1280
H(72)	0.186(3)	0.0636(7)	0.3076(7)	0.1280
H(73)	0.1477(15)	0.154(4)	0.2868(5)	0.1280
H(81)	0.3206(16)	0.1905(6)	0.189(5)	0.1740
H(82)	0.2675(14)	0.260(4)	0.211(3)	0.1740
H(83)	0.297(3)	0.262(4)	0.1252(13)	0.1740
H(91)	0.2678(17)	0.102(4)	-0.0485(11)	0.1340
H(92)	0.3200(6)	0.114(4)	0.0152(16)	0.1340
H(93)	0.280(2)	0.2007(8)	-0.010(3)	0.1340
H(101)	0.196(2)	-0.012(3)	-0.0437(12)	0.1310
H(102)	0.1318(5)	-0.030(3)	-0.004(3)	0.1310
H(103)	0.189(3)	-0.0901(10)	0.0213(17)	0.1310
*H(161)	-0.050(3)	0.274(4)	0.044(10)	0.2440
*H(162)	-0.0354(14)	0.168(9)	0.057(8)	0.2440
*H(163)	-0.0605(18)	0.202(13)	-0.0259(18)	0.2440
*H(164)	0.181(5)	0.400(3)	-0.089(10)	0.1090
*H(165)	0.185(5)	0.306(11)	-0.136(5)	0.1090
*H(166)	0.2212(12)	0.318(12)	-0.056(6)	0.1090
*H(171)	0.022(12)	0.395(3)	0.093(8)	0.3610
*H(172)	0.008(10)	0.435(11)	0.008(9)	0.3610
*H(173)	0.073(3)	0.451(8)	0.047(16)	0.3610
*H(174)	0.081(8)	0.141(14)	-0.166(10)	0.1720
*H(175)	0.112(13)	0.082(3)	-0.098(4)	0.1720
*H(176)	0.151(6)	0.153(12)	-0.148(13)	0.1720

L 2317-m3

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang ²]
*H(181)	0.175(5)	0.414(7)	-0.001(3)	0.1950
*H(182)	0.159(3)	0.422(7)	-0.092(6)	0.1950
*H(183)	0.2061(18)	0.3471(14)	-0.063(9)	0.1950
*H(184)	-0.003(6)	0.097(9)	0.020(8)	0.1240
*H(185)	-0.003(6)	0.108(11)	-0.074(6)	0.1240
*H(186)	-0.0459(13)	0.172(2)	-0.021(13)	0.1240
*H(191)	0.152(2)	0.194(5)	-0.1814(7)	0.1030
*H(192)	0.165(3)	0.1098(10)	-0.124(4)	0.1030
*H(193)	0.2050(10)	0.201(5)	-0.119(3)	0.1030
*H(194)	-0.054(2)	0.340(11)	0.032(3)	0.0850
*H(195)	-0.008(3)	0.399(5)	0.085(8)	0.0850
*H(196)	-0.024(5)	0.295(7)	0.108(6)	0.0850
*H(201)	0.0784(14)	0.038(2)	-0.080(5)	0.1220
*H(202)	0.031(4)	0.0879(15)	-0.136(2)	0.1220
*H(203)	0.011(3)	0.058(3)	-0.050(4)	0.1220
*H(204)	0.087(5)	0.462(3)	0.080(3)	0.0610
*H(205)	0.079(5)	0.4945(13)	-0.009(5)	0.0610
*H(206)	0.1440(12)	0.465(3)	0.022(7)	0.0610
H(211)	-0.0192(4)	0.0894(5)	0.1886(4)	0.0590
H(212)	-0.0298(4)	0.1977(5)	0.1893(4)	0.0590
H(221)	0.1725(4)	0.4522(6)	0.1277(7)	0.1140
H(222)	0.2257(4)	0.3852(6)	0.1560(7)	0.1140
H(231)	0.1798(5)	0.5211(8)	0.2391(6)	0.1410
H(232)	0.2249(5)	0.4439(8)	0.2720(6)	0.1410
H(241)	0.1509(5)	0.3764(8)	0.3371(5)	0.1280
H(242)	0.1084(5)	0.4618(8)	0.3141(5)	0.1280
H(251)	0.0885(4)	0.2976(6)	0.2628(5)	0.0830

Table S3 - Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang ²]
H(252)	0.0664(4)	0.3874(6)	0.2165(5)	0.0830
H(261)	0.0418(11)	0.5965(9)	0.1521(9)	0.2910
H(262)	-0.0297(11)	0.6142(9)	0.1507(9)	0.2910
H(271)	-0.0020(8)	0.7479(9)	0.1765(6)	0.1880
H(272)	0.0590(8)	0.7142(9)	0.2187(6)	0.1880

=====

The Temperature Factor has the Form of Exp(-T) Where
 $T = 8 * (\pi^2) * U * (\sin(\Theta) / \text{Lambd}a)^2$ for Isotropic Atoms

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	U(1,1)	or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Y(1)	0.0300(3)	0.0301(3)	0.0276(3)	0.0025(3)	0.0004(3)	0.0004(3)	0.0008(4)
O(1)	0.027(3)	0.035(3)	0.038(3)	0.000(2)	0.008(2)	0.008(2)	-0.005(2)
O(2)	0.049(3)	0.037(3)	0.046(3)	-0.003(2)	0.007(2)	0.007(2)	-0.009(2)
C(1)	0.028(4)	0.033(4)	0.032(4)	0.011(3)	-0.004(3)	-0.004(3)	0.004(3)
C(2)	0.044(5)	0.058(6)	0.028(4)	-0.002(4)	-0.013(3)	-0.013(3)	0.025(4)
C(3)	0.031(5)	0.035(5)	0.076(6)	-0.003(4)	-0.011(4)	-0.011(4)	0.006(4)
C(4)	0.037(5)	0.038(5)	0.057(5)	0.017(4)	0.017(3)	0.017(3)	0.014(4)
C(5)	0.051(5)	0.021(4)	0.032(4)	0.005(3)	-0.010(3)	-0.010(3)	0.009(4)
C(6)	0.044(5)	0.060(6)	0.097(6)	0.055(5)	0.002(5)	0.002(5)	0.007(5)
C(7)	0.107(8)	0.108(8)	0.040(5)	-0.011(5)	-0.027(5)	-0.027(5)	0.061(7)
C(8)	0.089(8)	0.046(7)	0.214(13)	0.016(7)	-0.096(8)	-0.096(8)	-0.014(6)
C(9)	0.082(7)	0.079(7)	0.106(7)	0.057(6)	0.057(6)	0.057(6)	0.036(6)
C(10)	0.167(11)	0.040(6)	0.054(5)	-0.001(4)	-0.035(6)	-0.035(6)	0.025(6)
C(11A)	0.035(9)	0.110(17)	0.042(8)	-0.019(8)	-0.010(7)	-0.010(7)	0.037(10)
C(11B)	0.001(5)						
C(12A)	0.096(18)	0.056(13)	0.061(12)	-0.007(11)	-0.035(13)	-0.035(13)	0.032(14)
C(12B)	0.09(2)						
C(13A)	0.075(17)	0.071(14)	0.102(14)	0.065(11)	-0.039(12)	-0.039(12)	-0.033(14)
C(13B)	0.021(8)						
C(14A)	0.041(8)	0.025(8)	0.021(5)	0.009(4)	-0.022(5)	-0.022(5)	-0.003(6)
C(14B)	0.013(6)						
C(15A)	0.032(7)	0.049(8)	0.019(5)	-0.005(5)	-0.006(5)	-0.006(5)	0.003(6)
C(15B)	0.019(7)						
C(16A)	0.046(9)	0.38(4)	0.057(9)	0.039(15)	-0.015(8)	-0.015(8)	0.077(15)
C(16B)	0.073(10)						
C(17A)	0.41(4)	0.139(19)	0.17(2)	-0.127(17)	-0.21(2)	-0.21(2)	0.21(3)
C(17B)	0.115(14)						

Table S4 - (An)isotropic Thermal Parameters (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Atom	U(1,1)	or U	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
C(18A)	0.25(2)	0.078(13)	0.063(10)	0.042(9)	-0.084(12)	-0.097(15)	
C(18B)	0.083(10)						
C(19A)	0.079(10)	0.108(13)	0.018(5)	0.004(6)	0.004(6)	0.037(9)	
C(19B)	0.057(8)						
C(20A)	0.109(12)	0.068(10)	0.067(9)	0.021(7)	-0.043(9)	-0.046(9)	
C(20B)	0.040(6)						
C(21)	0.050(5)	0.054(5)	0.043(4)	-0.007(4)	0.009(4)	-0.004(4)	
C(22)	0.091(8)	0.043(6)	0.151(10)	-0.020(6)	0.061(7)	-0.035(6)	
C(23)	0.138(11)	0.116(10)	0.098(8)	-0.045(8)	0.016(8)	-0.083(8)	
C(24)	0.145(11)	0.108(9)	0.066(6)	-0.032(6)	0.026(7)	-0.064(8)	
C(25)	0.091(7)	0.055(6)	0.062(5)	-0.028(5)	0.028(5)	-0.027(5)	
O(3)	0.58(4)	0.065(10)	0.233(19)	0	-0.24(2)	0	
C(26)	0.51(4)	0.073(11)	0.142(14)	-0.037(10)	-0.139(19)	0.107(18)	
C(27)	0.247(19)	0.130(12)	0.094(10)	0.048(8)	-0.027(12)	-0.005(14)	

=====

The Temperature Factor has the Form of $\exp(-T)$ Where
 $T = 8 * (\pi^2) * U * (\sin(\Theta) / \lambda^2) * \sin^2 \Theta$ for Isotropic Atoms
 $T = 2 * (\pi^2) * \sum_i \sum_j h(i) * h(j) * U(i, j) * \sin^2 \Theta$ for
Anisotropic Atoms. Astar(i) are Reciprocal Axial lengths and
h(i) are the Reflection Indices.

L2317.m4

L2317-m5

Table S5 - Bond Distances (Angstrom)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Y(1)	-O(1)	2.042(4)	C(5)	-C(10)	1.492(11)
Y(1)	-O(2)	2.398(5)	C(11A)	-C(12A)	1.44(3)
Y(1)	-C(1)	2.659(7)	C(11A)	-C(15A)	1.371(19)
Y(1)	-C(2)	2.657(7)	C(11A)	-C(16A)	1.41(2)
Y(1)	-C(3)	2.713(7)	C(11B)	-C(16B)	1.42(3)
Y(1)	-C(4)	2.724(7)	C(11B)	-C(12B)	1.44(4)
Y(1)	-C(5)	2.699(7)	C(11B)	-C(15B)	1.41(3)
Y(1)	-C(11A)	2.747(15)	C(12A)	-C(13A)	1.37(3)
Y(1)	-C(12A)	2.61(2)	C(12A)	-C(17A)	1.54(3)
Y(1)	-C(13A)	2.71(2)	C(12B)	-C(17B)	1.54(5)
Y(1)	-C(14A)	2.693(10)	C(12B)	-C(13B)	1.37(5)
Y(1)	-C(15A)	2.700(10)	C(13A)	-C(18A)	1.56(3)
Y(1)	-C(11B)	2.66(2)	C(13A)	-C(14A)	1.39(2)
Y(1)	-C(12B)	2.69(5)	C(13B)	-C(14B)	1.39(4)
Y(1)	-C(13B)	2.51(3)	C(13B)	-C(18B)	1.54(4)
Y(1)	-C(14B)	2.74(2)	C(14A)	-C(15A)	1.364(19)
Y(1)	-C(15B)	2.79(2)	C(14A)	-C(19A)	1.511(18)
O(1)	-C(21)	1.359(9)	C(14B)	-C(19B)	1.49(3)
O(2)	-C(22)	1.426(10)	C(14B)	-C(15B)	1.36(3)
O(2)	-C(25)	1.415(10)	C(15A)	-C(20A)	1.539(16)
C(1)	-C(2)	1.376(10)	C(15B)	-C(20B)	1.53(3)
C(1)	-C(5)	1.413(9)	C(21)	-C(21)a	1.484(9)
C(1)	-C(6)	1.472(11)	C(22)	-C(23)	1.437(15)
C(2)	-C(3)	1.422(10)	C(23)	-C(24)	1.481(15)
C(2)	-C(7)	1.503(10)	C(24)	-C(25)	1.449(13)
C(3)	-C(4)	1.383(11)	C(6)	-H(61)	0.96(3)
C(3)	-C(8)	1.500(12)	C(6)	-H(62)	0.96(3)
C(4)	-C(5)	1.400(10)	C(6)	-H(63)	0.96(3)
C(4)	-C(9)	1.533(12)	C(7)	-H(71)	0.96(4)

Table S5 - Bond Distances (Angstrom) (continued)

for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(7)	-H(72)	0.959(14)	C(19A)	-H(191)	0.96(3)
C(7)	-H(73)	0.97(4)	C(19A)	-H(193)	0.96(4)
C(8)	-H(81)	0.96(4)	C(19A)	-H(192)	0.96(2)
C(8)	-H(82)	0.96(5)	C(19B)	-H(195)	0.97(9)
C(8)	-H(83)	0.96(4)	C(19B)	-H(196)	0.95(10)
C(9)	-H(91)	0.96(3)	C(19B)	-H(194)	0.96(5)
C(9)	-H(92)	0.96(2)	C(20A)	-H(201)	0.96(3)
C(9)	-H(93)	0.958(16)	C(20A)	-H(203)	0.96(7)
C(10)	-H(101)	0.96(3)	C(20A)	-H(202)	0.95(4)
C(10)	-H(102)	0.960(17)	C(20B)	-H(205)	0.96(8)
C(10)	-H(103)	0.96(3)	C(20B)	-H(206)	0.96(4)
C(16A)	-H(161)	0.96(9)	C(20B)	-H(204)	0.96(6)
C(16A)	-H(162)	0.96(13)	C(21)	-H(211)	0.969(10)
C(16A)	-H(163)	0.96(6)	C(21)	-H(212)	0.971(11)
C(16B)	-H(164)	0.95(5)	C(22)	-H(221)	0.971(15)
C(16B)	-H(165)	0.96(10)	C(22)	-H(222)	0.970(13)
C(16B)	-H(166)	0.96(7)	C(23)	-H(231)	0.970(16)
C(17A)	-H(173)	0.97(9)	C(23)	-H(232)	0.970(15)
C(17A)	-H(171)	0.95(16)	C(24)	-H(241)	0.969(14)
C(17A)	-H(172)	0.96(19)	C(24)	-H(242)	0.970(15)
C(17B)	-H(174)	0.96(17)	C(25)	-H(251)	0.969(12)
C(17B)	-H(175)	0.96(6)	C(25)	-H(252)	0.970(12)
C(17B)	-H(176)	0.95(15)	O(3)	-C(26)	1.381(17)
C(18A)	-H(183)	0.96(5)	C(26)	-C(27)	1.316(18)
C(18A)	-H(181)	0.96(7)	C(27)	-C(27)b	1.439(17)
C(18A)	-H(182)	0.96(10)	C(26)	-H(261)	0.97(3)
C(18B)	-H(184)	0.97(13)	C(26)	-H(262)	0.97(3)
C(18B)	-H(185)	0.97(12)	C(27)	-H(271)	0.970(18)
C(18B)	-H(186)	0.96(4)	C(27)	-H(272)	0.97(2)

Table S6 - Bond Angles (Degrees)
for: SI037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

O(1)	-Y(1)	-O(2)	89.54(16)	O(2)	-Y(1)	-C(14B)	86.5(5)
O(1)	-Y(1)	-C(1)	81.02(19)	O(2)	-Y(1)	-C(15B)	73.7(5)
O(1)	-Y(1)	-C(2)	86.89(18)	C(1)	-Y(1)	-C(2)	30.0(2)
O(1)	-Y(1)	-C(3)	117.0(2)	C(1)	-Y(1)	-C(3)	50.0(2)
O(1)	-Y(1)	-C(4)	130.66(19)	C(1)	-Y(1)	-C(4)	49.8(2)
O(1)	-Y(1)	-C(5)	106.78(19)	C(1)	-Y(1)	-C(5)	30.6(2)
O(1)	-Y(1)	-C(11A)	80.5(3)	C(1)	-Y(1)	-C(11A)	130.7(4)
O(1)	-Y(1)	-C(12A)	97.2(5)	C(1)	-Y(1)	-C(12A)	160.5(4)
O(1)	-Y(1)	-C(13A)	126.4(4)	C(1)	-Y(1)	-C(13A)	144.0(5)
O(1)	-Y(1)	-C(14A)	127.9(4)	C(1)	-Y(1)	-C(14A)	116.6(3)
O(1)	-Y(1)	-C(15A)	99.0(3)	C(1)	-Y(1)	-C(15A)	112.5(3)
O(1)	-Y(1)	-C(11B)	134.7(4)	C(1)	-Y(1)	-C(11B)	137.3(5)
O(1)	-Y(1)	-C(12B)	117.2(8)	C(1)	-Y(1)	-C(12B)	121.1(7)
O(1)	-Y(1)	-C(13B)	87.7(7)	C(1)	-Y(1)	-C(13B)	126.0(6)
O(1)	-Y(1)	-C(14B)	84.1(5)	C(1)	-Y(1)	-C(14B)	152.8(5)
O(1)	-Y(1)	-C(15B)	108.9(5)	C(1)	-Y(1)	-C(15B)	166.8(5)
O(2)	-Y(1)	-C(1)	115.96(18)	C(2)	-Y(1)	-C(3)	30.7(2)
O(2)	-Y(1)	-C(2)	86.77(19)	C(2)	-Y(1)	-C(4)	49.5(2)
O(2)	-Y(1)	-C(3)	81.73(19)	C(2)	-Y(1)	-C(5)	49.8(2)
O(2)	-Y(1)	-C(4)	106.96(18)	C(2)	-Y(1)	-C(11A)	159.5(4)
O(2)	-Y(1)	-C(5)	130.98(18)	C(2)	-Y(1)	-C(12A)	169.2(5)
O(2)	-Y(1)	-C(11A)	109.1(4)	C(2)	-Y(1)	-C(13A)	146.5(4)
O(2)	-Y(1)	-C(12A)	83.3(4)	C(2)	-Y(1)	-C(14A)	133.6(4)
O(2)	-Y(1)	-C(13A)	89.6(5)	C(2)	-Y(1)	-C(15A)	140.9(3)
O(2)	-Y(1)	-C(14A)	118.5(2)	C(2)	-Y(1)	-C(11B)	138.3(4)
O(2)	-Y(1)	-C(15A)	131.6(2)	C(2)	-Y(1)	-C(12B)	142.6(7)
O(2)	-Y(1)	-C(11B)	90.8(5)	C(2)	-Y(1)	-C(13B)	156.0(6)
O(2)	-Y(1)	-C(12B)	119.3(6)	C(2)	-Y(1)	-C(14B)	168.8(5)
O(2)	-Y(1)	-C(13B)	116.6(6)	C(2)	-Y(1)	-C(15B)	154.3(5)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: SI037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(3)	-Y(1)	-C(4)	29.5(2)	C(5)	-Y(1)	-C(12B)	94.1(7)
C(3)	-Y(1)	-C(5)	49.5(2)	C(5)	-Y(1)	-C(13B)	110.1(7)
C(3)	-Y(1)	-C(11A)	160.1(4)	C(5)	-Y(1)	-C(14B)	139.8(5)
C(3)	-Y(1)	-C(12A)	142.4(5)	C(5)	-Y(1)	-C(15B)	136.3(5)
C(3)	-Y(1)	-C(13A)	115.9(4)	C(11A)	-Y(1)	-C(12A)	31.0(6)
C(3)	-Y(1)	-C(14A)	110.3(4)	C(11A)	-Y(1)	-C(13A)	49.7(5)
C(3)	-Y(1)	-C(15A)	132.1(3)	C(11A)	-Y(1)	-C(14A)	50.1(5)
C(3)	-Y(1)	-C(11B)	107.8(5)	C(11A)	-Y(1)	-C(15A)	29.1(4)
C(3)	-Y(1)	-C(12B)	121.2(8)	C(12A)	-Y(1)	-C(13A)	29.7(6)
C(3)	-Y(1)	-C(13B)	150.4(7)	C(12A)	-Y(1)	-C(14A)	49.9(5)
C(3)	-Y(1)	-C(14B)	155.5(5)	C(12A)	-Y(1)	-C(15A)	48.4(4)
C(3)	-Y(1)	-C(15B)	127.2(5)	C(13A)	-Y(1)	-C(14A)	29.7(5)
C(4)	-Y(1)	-C(5)	29.9(2)	C(13A)	-Y(1)	-C(15A)	47.5(5)
C(4)	-Y(1)	-C(11A)	131.8(4)	C(14A)	-Y(1)	-C(15A)	29.3(4)
C(4)	-Y(1)	-C(12A)	130.1(5)	C(11B)	-Y(1)	-C(12B)	31.2(8)
C(4)	-Y(1)	-C(13A)	100.4(5)	C(11B)	-Y(1)	-C(13B)	52.4(8)
C(4)	-Y(1)	-C(14A)	84.7(4)	C(11B)	-Y(1)	-C(14B)	50.8(7)
C(4)	-Y(1)	-C(15A)	102.9(3)	C(11B)	-Y(1)	-C(15B)	29.9(7)
C(4)	-Y(1)	-C(11B)	92.2(5)	C(12B)	-Y(1)	-C(13B)	30.2(10)
C(4)	-Y(1)	-C(12B)	94.9(8)	C(12B)	-Y(1)	-C(14B)	48.5(9)
C(4)	-Y(1)	-C(13B)	121.7(7)	C(12B)	-Y(1)	-C(15B)	47.0(8)
C(4)	-Y(1)	-C(14B)	141.4(5)	C(13B)	-Y(1)	-C(14B)	30.3(8)
C(4)	-Y(1)	-C(15B)	120.3(5)	C(13B)	-Y(1)	-C(15B)	48.2(8)
C(5)	-Y(1)	-C(11A)	118.9(4)	C(14B)	-Y(1)	-C(15B)	28.3(6)
C(5)	-Y(1)	-C(12A)	136.9(4)	Y(1)	-O(1)	-C(21)	168.2(4)
C(5)	-Y(1)	-C(13A)	113.5(5)	Y(1)	-O(2)	-C(22)	134.5(5)
C(5)	-Y(1)	-C(14A)	87.5(3)	Y(1)	-O(2)	-C(25)	119.6(4)
C(5)	-Y(1)	-C(15A)	92.0(3)	C(22)	-O(2)	-C(25)	105.5(6)
C(5)	-Y(1)	-C(11B)	106.8(5)	Y(1)	-C(1)	-C(2)	74.9(4)

L2317-m6

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Y(1)	-C(1)	-C(5)	76.3(4)	Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	69.4(10)
Y(1)	-C(1)	-C(6)	117.9(5)	Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	73.5(8)
C(2)	-C(1)	-C(5)	107.9(6)	Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	120.2(10)
C(2)	-C(1)	-C(6)	126.3(6)	C(12A)	-C(11A)	-C(15A)	101.7(14)
C(5)	-C(1)	-C(6)	125.6(6)	C(12A)	-C(11A)	-C(16A)	126.8(17)
Y(1)	-C(2)	-C(1)	75.1(4)	C(15A)	-C(11A)	-C(16A)	131.5(16)
Y(1)	-C(2)	-C(3)	76.8(4)	Y(1)	-C(11B)	-C(16B)	133.2(16)
Y(1)	-C(2)	-C(7)	116.1(5)	C(12B)	-C(11B)	-C(15B)	100(2)
C(1)	-C(2)	-C(3)	108.6(6)	C(12B)	-C(11B)	-C(16B)	124(3)
C(1)	-C(2)	-C(7)	125.2(7)	C(15B)	-C(11B)	-C(16B)	127(2)
C(3)	-C(2)	-C(7)	126.2(7)	Y(1)	-C(11B)	-C(12B)	76(2)
Y(1)	-C(3)	-C(2)	72.5(4)	Y(1)	-C(11B)	-C(15B)	79.9(13)
Y(1)	-C(3)	-C(4)	75.7(4)	Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	79.6(10)
Y(1)	-C(3)	-C(8)	124.2(5)	C(11A)	-C(12A)	-C(17A)	125.1(19)
C(2)	-C(3)	-C(4)	107.1(6)	C(13A)	-C(12A)	-C(17A)	124.2(19)
C(2)	-C(3)	-C(8)	124.9(8)	C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	109.4(17)
C(4)	-C(3)	-C(8)	127.4(8)	Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	78.9(13)
Y(1)	-C(4)	-C(3)	74.8(4)	Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	119.0(12)
Y(1)	-C(4)	-C(5)	74.1(4)	Y(1)	-C(12B)	-C(17B)	121(2)
Y(1)	-C(4)	-C(9)	127.2(5)	Y(1)	-C(12B)	-C(11B)	73(2)
C(3)	-C(4)	-C(5)	109.0(6)	C(11B)	-C(12B)	-C(13B)	109(3)
C(3)	-C(4)	-C(9)	122.0(6)	C(11B)	-C(12B)	-C(17B)	129(3)
C(5)	-C(4)	-C(9)	127.8(6)	C(13B)	-C(12B)	-C(17B)	121(3)
Y(1)	-C(5)	-C(1)	73.1(4)	Y(1)	-C(12B)	-C(13B)	68(2)
Y(1)	-C(5)	-C(4)	76.0(4)	C(12A)	-C(13A)	-C(18A)	129.6(19)
Y(1)	-C(5)	-C(10)	122.5(5)	Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	71.4(12)
C(1)	-C(5)	-C(4)	107.4(6)	Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	74.6(10)
C(1)	-C(5)	-C(10)	124.2(7)	C(14A)	-C(13A)	-C(18A)	121.4(17)
C(4)	-C(5)	-C(10)	128.0(7)	C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	108.8(18)

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	115.9(12)	C(14B)	-C(15B)	-C(20B)	126(2)
C(12B)	-C(13B)	-C(14B)	108(2)	Y(1)	-C(15B)	-C(14B)	74.0(13)
Y(1)	-C(13B)	-C(18B)	118.2(19)	O(1)	-C(21)	-C(21)a	116.0(7)
Y(1)	-C(13B)	-C(12B)	82(2)	O(2)	-C(22)	-C(23)	108.2(8)
Y(1)	-C(13B)	-C(14B)	84.1(17)	C(22)	-C(23)	-C(24)	106.8(9)
C(12B)	-C(13B)	-C(18B)	126(3)	C(23)	-C(24)	-C(25)	104.3(7)
C(14B)	-C(13B)	-C(18B)	122(2)	O(2)	-C(25)	-C(24)	108.2(7)
Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	75.6(10)	C(1)	-C(6)	-H(61)	109.3(13)
C(13A)	-C(14A)	-C(19A)	129.8(14)	C(1)	-C(6)	-H(62)	109(2)
C(15A)	-C(14A)	-C(19A)	122.8(10)	C(1)	-C(6)	-H(63)	109.5(17)
C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	104.8(14)	H(61)	-C(6)	-H(62)	109(3)
Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	75.6(6)	H(61)	-C(6)	-H(63)	110(3)
Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	127.8(9)	H(62)	-C(6)	-H(63)	109(3)
Y(1)	-C(14B)	-C(19B)	117.8(17)	C(2)	-C(7)	-H(71)	109.6(15)
C(13B)	-C(14B)	-C(15B)	105(2)	C(2)	-C(7)	-H(72)	109.5(12)
C(13B)	-C(14B)	-C(19B)	129(2)	C(2)	-C(7)	-H(73)	109.3(9)
C(15B)	-C(14B)	-C(19B)	126(2)	H(71)	-C(7)	-H(72)	110(4)
Y(1)	-C(14B)	-C(13B)	65.7(15)	H(71)	-C(7)	-H(73)	109(4)
Y(1)	-C(14B)	-C(15B)	77.6(13)	H(72)	-C(7)	-H(73)	110(5)
Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	77.3(8)	C(3)	-C(8)	-H(81)	109.4(16)
Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	75.1(6)	C(3)	-C(8)	-H(82)	109(2)
C(11A)	-C(15A)	-C(20A)	121.0(11)	C(3)	-C(8)	-H(83)	110(3)
C(14A)	-C(15A)	-C(20A)	123.9(10)	H(81)	-C(8)	-H(82)	110(5)
C(11A)	-C(15A)	-C(14A)	114.6(11)	H(81)	-C(8)	-H(83)	109(5)
Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	122.9(7)	H(82)	-C(8)	-H(83)	110(5)
C(11B)	-C(15B)	-C(14B)	113.8(19)	C(4)	-C(9)	-H(91)	109(2)
Y(1)	-C(15B)	-C(20B)	123.3(14)	C(4)	-C(9)	-H(92)	109(2)
Y(1)	-C(15B)	-C(11B)	70.1(12)	C(4)	-C(9)	-H(93)	109(3)
C(11B)	-C(15B)	-C(20B)	120.4(19)	H(91)	-C(9)	-H(92)	109(4)

L2317-m7

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(15A)	-C(20A)	-H(203)	109(3)	C(24)	-C(23)	-H(232)	110.4(11)
H(201)	-C(20A)	-H(202)	110(6)	C(23)	-C(24)	-H(241)	110.9(12)
H(201)	-C(20A)	-H(203)	110(5)	C(25)	-C(24)	-H(242)	110.9(11)
H(202)	-C(20A)	-H(203)	109(6)	C(23)	-C(24)	-H(242)	110.9(12)
C(15B)	-C(20B)	-H(206)	109(4)	C(25)	-C(24)	-H(241)	110.9(12)
C(15B)	-C(20B)	-H(204)	109(4)	H(241)	-C(24)	-H(242)	108.9(11)
C(15B)	-C(20B)	-H(205)	110(4)	H(251)	-C(25)	-H(252)	108.4(11)
H(205)	-C(20B)	-H(206)	109(8)	O(2)	-C(25)	-H(251)	110.1(9)
H(204)	-C(20B)	-H(205)	109(7)	O(2)	-C(25)	-H(252)	110.0(9)
H(204)	-C(20B)	-H(206)	110(9)	C(24)	-C(25)	-H(251)	110.1(9)
O(1)	-C(21)	-H(211)	108.2(8)	C(24)	-C(25)	-H(252)	110.0(10)
C(21)a	-C(21)	-H(211)	108.3(7)	C(26)	-O(3)	-C(26)b	107.9(13)
O(1)	-C(21)	-H(212)	108.2(8)	O(3)	-C(26)	-C(27)	105.7(12)
H(211)	-C(21)	-H(212)	107.4(10)	C(26)	-C(27)	-C(27)b	104.4(13)
C(21)a	-C(21)	-H(212)	108.3(8)	O(3)	-C(26)	-H(261)	110.5(17)
C(23)	-C(22)	-H(222)	110.1(11)	O(3)	-C(26)	-H(262)	110.6(19)
O(2)	-C(22)	-H(221)	110.0(10)	C(27)	-C(26)	-H(261)	111(2)
O(2)	-C(22)	-H(222)	110.0(9)	C(27)	-C(26)	-H(262)	110.6(18)
C(23)	-C(22)	-H(221)	110.1(10)	H(261)	-C(26)	-H(262)	109(2)
H(221)	-C(22)	-H(222)	108.4(13)	C(26)	-C(27)	-H(271)	110.9(15)
C(22)	-C(23)	-H(232)	110.4(11)	C(26)	-C(27)	-H(272)	110.9(18)
C(22)	-C(23)	-H(231)	110.4(11)	H(271)	-C(27)	-H(272)	108.9(18)
H(231)	-C(23)	-H(232)	108.5(14)	C(27)b	-C(27)	-H(271)	110.9(16)
C(24)	-C(23)	-H(231)	110.4(12)	C(27)b	-C(27)	-H(272)	110.8(13)

42317-m8

Table S6 - Bond Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

H(91)	-C(9)	-H(93)	110(4)	C(12B)	-C(17B)	-H(176)	109(12)
H(92)	-C(9)	-H(93)	110(4)	H(174)	-C(17B)	-H(175)	110(18)
C(5)	-C(10)	-H(101)	110(2)	H(174)	-C(17B)	-H(176)	110(16)
C(5)	-C(10)	-H(102)	110(3)	C(13A)	-C(18A)	-H(182)	110(5)
C(5)	-C(10)	-H(103)	109(2)	C(13A)	-C(18A)	-H(183)	109(2)
H(101)	-C(10)	-H(102)	109(4)	H(181)	-C(18A)	-H(182)	110(8)
H(101)	-C(10)	-H(103)	109(4)	C(13A)	-C(18A)	-H(181)	110(6)
H(102)	-C(10)	-H(103)	110(5)	H(181)	-C(18A)	-H(183)	109(10)
C(11A)	-C(16A)	-H(161)	109(4)	H(182)	-C(18A)	-H(183)	109(9)
C(11A)	-C(16A)	-H(162)	109(3)	C(13B)	-C(18B)	-H(186)	109(3)
C(11A)	-C(16A)	-H(163)	110(3)	C(13B)	-C(18B)	-H(184)	109(8)
H(161)	-C(16A)	-H(162)	109(11)	C(13B)	-C(18B)	-H(185)	109(9)
H(161)	-C(16A)	-H(163)	110(12)	H(184)	-C(18B)	-H(186)	110(13)
H(162)	-C(16A)	-H(163)	110(12)	H(185)	-C(18B)	-H(186)	110(14)
H(164)	-C(16B)	-H(166)	109(13)	H(184)	-C(18B)	-H(185)	109(12)
H(165)	-C(16B)	-H(166)	109(10)	C(14A)	-C(19A)	-H(193)	109(3)
C(11B)	-C(16B)	-H(166)	109(7)	H(191)	-C(19A)	-H(193)	109(5)
C(11B)	-C(16B)	-H(164)	110(8)	H(192)	-C(19A)	-H(193)	109(6)
C(11B)	-C(16B)	-H(165)	110(8)	H(191)	-C(19A)	-H(192)	110(6)
H(164)	-C(16B)	-H(165)	110(14)	C(14A)	-C(19A)	-H(191)	110(3)
C(12A)	-C(17A)	-H(173)	109(9)	C(14A)	-C(19A)	-H(192)	110(4)
C(12A)	-C(17A)	-H(171)	110(5)	C(14B)	-C(19B)	-H(194)	110(5)
C(12A)	-C(17A)	-H(172)	109(9)	C(14B)	-C(19B)	-H(195)	109(5)
H(171)	-C(17A)	-H(173)	110(19)	C(14B)	-C(19B)	-H(196)	109(7)
H(172)	-C(17A)	-H(173)	109(15)	H(194)	-C(19B)	-H(195)	110(11)
H(171)	-C(17A)	-H(172)	109(18)	H(194)	-C(19B)	-H(196)	109(9)
C(12B)	-C(17B)	-H(174)	109(12)	H(195)	-C(19B)	-H(196)	110(10)
C(12B)	-C(17B)	-H(175)	109(6)	C(15A)	-C(20A)	-H(201)	109(3)
H(175)	-C(17B)	-H(176)	110(20)	C(15A)	-C(20A)	-H(202)	109.4(19)

L2317-m9

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

O(1)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-178.4(7)
O(1)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-5.6(5)
C(1)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	101.9(7)
C(1)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-85.4(5)
C(2)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	94.7(7)
C(2)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-92.5(5)
C(3)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	64.3(7)
C(3)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-122.9(5)
C(4)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	48.9(7)
C(4)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-138.3(5)
C(5)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	69.6(7)
C(5)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	-117.7(5)
C(11A)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-98.5(7)
C(11A)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	74.2(6)
C(12A)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-81.1(8)
C(12A)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	91.7(7)
C(13A)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-51.9(8)
C(13A)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	120.9(6)
C(14A)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-44.3(8)
C(14A)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	128.4(6)
C(15A)	-Y(1)	-O(2)	-C(22)	-76.7(7)
C(15A)	-Y(1)	-O(2)	-C(25)	96.1(6)
O(1)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	-99.4(4)
O(1)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	147.4(4)
O(1)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	24.0(5)
O(2)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	-14.4(4)
O(2)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	-127.6(4)
O(2)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	109.1(5)
C(2)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	-113.2(6)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	123.5(7)
C(3)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	37.6(4)
C(3)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	-75.6(4)
C(3)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	161.0(6)
C(4)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	76.4(4)
C(4)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	-36.8(4)
C(4)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-160.1(6)
C(5)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	113.2(6)
C(5)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-123.3(7)
C(11A)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	-168.6(5)
C(11A)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	78.2(6)
C(11A)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-45.1(7)
C(13A)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	116.8(8)
C(13A)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	3.6(9)
C(13A)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-119.7(9)
C(14A)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	132.5(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	19.3(6)
C(14A)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-104.1(6)
C(15A)	-Y(1)	-C(1)	-C(2)	164.4(4)
C(15A)	-Y(1)	-C(1)	-C(5)	51.2(5)
C(15A)	-Y(1)	-C(1)	-C(6)	-72.1(6)
O(1)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	77.4(4)
O(1)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	-168.9(4)
O(1)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	-44.9(6)
O(2)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	167.1(4)
O(2)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	-79.2(4)
O(2)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	44.9(5)
C(1)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	113.7(6)
C(1)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	-122.2(7)

L2317-m10

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	113.4(6)
C(2)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	-120.8(10)
C(4)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-113.4(6)
C(4)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	125.8(10)
C(5)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-77.1(4)
C(5)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	36.3(4)
C(5)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	162.1(9)
C(12A)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	165.3(7)
C(12A)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	-81.3(8)
C(12A)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	44.5(11)
C(13A)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-176.8(6)
C(13A)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	-63.4(7)
C(13A)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	62.4(10)
C(14A)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-145.0(4)
C(14A)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	-31.5(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	94.2(8)
C(15A)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-121.8(5)
C(15A)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	-8.3(6)
C(15A)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	117.4(8)
O(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	-72.2(5)
O(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	43.1(5)
O(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	168.8(6)
O(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	32.3(4)
O(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	147.7(4)
O(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	-86.7(6)
C(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	-77.7(4)
C(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	37.7(4)
C(1)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	163.4(7)
C(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	-38.0(4)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(3)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-113.7(6)
C(3)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	124.1(8)
C(4)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-77.3(4)
C(4)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	36.4(4)
C(4)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	160.5(7)
C(5)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-37.7(4)
C(5)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	76.0(4)
C(5)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	-160.0(7)
C(11A)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	25.3(11)
C(11A)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	139.0(10)
C(11A)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	-96.9(11)
C(13A)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-108.5(10)
C(13A)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	5.2(10)
C(13A)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	129.3(10)
C(14A)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-65.6(6)
C(14A)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	48.1(6)
C(14A)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	172.1(6)
C(15A)	-Y(1)	-C(2)	-C(1)	-23.1(6)
C(15A)	-Y(1)	-C(2)	-C(3)	90.5(6)
C(15A)	-Y(1)	-C(2)	-C(7)	-145.4(6)
O(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	12.4(5)
O(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	125.8(4)
O(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	-108.4(8)
O(2)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	97.7(4)
O(2)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	-148.9(4)
O(2)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	-23.1(8)
C(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(2)	-36.7(4)
C(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(4)	76.8(4)
C(1)	-Y(1)	-C(3)	-C(8)	-157.5(9)

L 2317 mil

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	77.4(4)
C(2)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	-156.9(7)
C(3)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	115.4(6)
C(3)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	-118.9(8)
C(5)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	-115.4(6)
C(5)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	125.7(8)
C(11A)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	169.3(6)
C(11A)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	-75.3(6)
C(11A)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	50.4(8)
C(12A)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	127.9(7)
C(12A)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	-116.7(7)
C(12A)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	9.0(9)
C(13A)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	125.1(6)
C(13A)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	-119.5(6)
C(13A)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	6.2(8)
C(14A)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	150.5(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	-94.1(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	31.5(7)
C(15A)	-Y(1)	-C(4)	-C(3)	173.7(4)
C(15A)	-Y(1)	-C(4)	-C(5)	-71.0(4)
C(15A)	-Y(1)	-C(4)	-C(9)	54.7(7)
O(1)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-33.8(4)
O(1)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	-147.2(4)
O(1)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	86.4(6)
O(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	70.7(4)
O(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	-42.7(5)
O(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-169.0(5)
C(1)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	-113.4(6)
C(1)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	120.3(8)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	37.0(4)
C(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	-76.4(4)
C(2)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	157.2(7)
C(3)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	77.6(4)
C(3)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	-35.8(4)
C(3)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-162.1(7)
C(4)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	113.4(6)
C(4)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-126.4(8)
C(11A)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-122.1(5)
C(11A)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	124.5(5)
C(11A)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-1.9(7)
C(12A)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-154.7(8)
C(12A)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	91.9(8)
C(12A)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-34.4(10)
C(13A)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-177.7(6)
C(13A)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	68.9(6)
C(13A)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-57.4(8)
C(14A)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-162.8(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	83.8(5)
C(14A)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-42.6(7)
C(15A)	-Y(1)	-C(5)	-C(1)	-133.9(4)
C(15A)	-Y(1)	-C(5)	-C(4)	112.8(4)
C(15A)	-Y(1)	-C(5)	-C(10)	-13.6(6)
O(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	121.6(10)
O(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-128.7(8)
O(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	0(2)
O(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	35.4(10)
O(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	145.1(7)
O(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	-86.1(15)

L2317.m12

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(3)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	33.9(15)
C(3)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-89.1(17)
C(4)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	106.8(10)
C(4)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-5.5(15)
C(4)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-128.6(15)
C(5)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	66.2(13)
C(5)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-46.2(15)
C(5)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-169.2(13)
C(11A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-112.4(16)
C(11A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	125(2)
C(13A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	112.4(16)
C(13A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-123(2)
C(14A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	76.9(10)
C(14A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-35.5(11)
C(14A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-159(2)
C(15A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	37.8(8)
C(15A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-74.6(12)
C(15A)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	162(2)
O(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	12.0(14)
O(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-104.4(11)
O(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	137.8(11)
O(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	-77.1(12)
O(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	166.5(10)
O(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	48.6(13)
C(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	145.4(10)
C(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	29.0(15)
C(1)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-88.8(15)
C(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	-160.7(9)
C(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	82.9(13)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-169.1(9)
C(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-59.4(9)
C(1)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	69.5(15)
C(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	174.6(10)
C(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-75.7(13)
C(2)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	53(2)
C(4)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-101.0(10)
C(4)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	8.7(10)
C(4)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	137.6(13)
C(5)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-134.4(9)
C(5)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-24.7(9)
C(5)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	104.1(14)
C(12A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	109.7(13)
C(12A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	-121.5(19)
C(13A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-37.0(11)
C(13A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	72.7(9)
C(13A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	-158.5(18)
C(14A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-76.2(10)
C(14A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	33.5(7)
C(14A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	162.3(17)
C(15A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-109.7(13)
C(15A)	-Y(1)	-C(11A)	-C(16A)	128.8(19)
O(1)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	-57.9(10)
O(1)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-170.3(12)
O(1)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	66.7(16)
O(2)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	-146.6(10)
O(2)	-Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	101.0(12)
O(2)	-Y(1)	-C(12A)	-C(17A)	-22.0(16)
C(3)	-Y(1)	-C(12A)	-C(11A)	146.3(8)

L2317-m13

- 27 -

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-130.8(10)
C(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	119.5(7)
C(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-1.2(13)
C(3)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-106.9(11)
C(3)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	143.3(6)
C(3)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	22.7(11)
C(4)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-121.9(11)
C(4)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	128.4(6)
C(4)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	7.7(11)
C(5)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-151.7(11)
C(5)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	98.5(6)
C(5)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-22.1(11)
C(11A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	76.4(11)
C(11A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-33.3(7)
C(11A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-154.0(13)
C(12A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	35.5(11)
C(12A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-74.2(9)
C(12A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	165.2(14)
C(13A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-109.8(14)
C(13A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	129.6(18)
C(15A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	109.8(14)
C(15A)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-120.6(12)
O(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	51.2(8)
O(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	171.3(6)
O(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	-67.7(9)
O(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-46.3(9)
O(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	73.8(7)
O(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	-165.2(8)
C(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	135.1(8)

- 26 -

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(2)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-35.0(19)
C(3)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	-157.8(11)
C(3)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	85.8(11)
C(3)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-32.0(15)
C(4)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	175.7(11)
C(4)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	59.3(11)
C(4)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-58.6(14)
C(5)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	147.5(11)
C(5)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	31.1(12)
C(5)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-86.8(14)
C(11A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	38.7(11)
C(11A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-77.7(12)
C(11A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	164.4(17)
C(12A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-116.4(17)
C(12A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	126(2)
C(14A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	116.4(17)
C(14A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-117.9(19)
C(15A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(12A)	77.7(12)
C(15A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-38.6(10)
C(15A)	-Y(1)	-C(13A)	-C(18A)	-156.5(17)
O(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	98.8(10)
O(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-10.9(8)
O(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-131.5(10)
O(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-15.4(12)
O(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-125.2(6)
O(2)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	114.2(10)
C(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(13A)	-161.4(10)
C(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	88.8(7)
C(1)	-Y(1)	-C(14A)	-C(19A)	-31.8(12)

L2317.m14

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

Y(1)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	111.7(7)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-Y(1)	69.8(5)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-0.4(8)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	-178.5(7)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-Y(1)	-113.8(7)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	176.0(7)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	-2.2(12)
Y(1)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	68.9(5)
Y(1)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	-118.2(7)
C(2)	-C(1)	-C(5)	-Y(1)	-68.9(5)
C(2)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	0.0(15)
C(2)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	172.9(7)
C(6)	-C(1)	-C(5)	-Y(1)	114.7(7)
C(6)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	-176.3(7)
C(6)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	-3.5(12)
Y(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	-68.4(5)
Y(1)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	119.9(7)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-Y(1)	69.0(5)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	0.6(8)
C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	-171.1(7)
C(7)	-C(2)	-C(3)	-Y(1)	-112.9(7)
C(7)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	178.7(7)
C(7)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	7.1(12)
Y(1)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	-66.8(5)
Y(1)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	124.7(7)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-Y(1)	66.3(5)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	-0.5(9)
C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	-169.1(7)
C(8)	-C(3)	-C(4)	-Y(1)	-122.4(8)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	-104.7(6)
C(1)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	16.2(10)
C(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	147.4(8)
C(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	-92.5(7)
C(2)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	28.5(11)
C(3)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-169.1(8)
C(3)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	-49.0(8)
C(3)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	72.0(10)
C(4)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-173.3(8)
C(4)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	-53.2(7)
C(4)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	67.8(9)
C(5)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	158.5(8)
C(5)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	-81.3(6)
C(5)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	39.6(9)
C(11A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	120.1(11)
C(11A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	-118.9(13)
C(12A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-40.4(10)
C(12A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	79.7(9)
C(12A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	-159.4(12)
C(13A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-80.9(10)
C(13A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(14A)	39.3(8)
C(13A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	160.2(12)
C(14A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(11A)	-120.1(11)
C(14A)	-Y(1)	-C(15A)	-C(20A)	121.0(12)
Y(1)	-O(2)	-C(22)	-C(23)	-164.3(6)
C(25)	-O(2)	-C(22)	-C(23)	22.2(9)
Y(1)	-O(2)	-C(25)	-C(24)	158.0(6)
C(22)	-O(2)	-C(25)	-C(24)	-27.4(9)
Y(1)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-70.2(5)

L 2317-m15

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	-9(2)
C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	-C(18A)	176.7(18)
C(17A)	-C(12A)	-C(13A)	-Y(1)	117.6(19)
C(17A)	-C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	-176.6(17)
C(17A)	-C(12A)	-C(13A)	-C(18A)	9(3)
Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	70.6(8)
Y(1)	-C(13A)	-C(14A)	-C(19A)	-127.6(16)
C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	-Y(1)	-63.7(15)
C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	6.8(19)
C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	-C(19A)	168.6(15)
C(18A)	-C(13A)	-C(14A)	-Y(1)	111.2(17)
C(18A)	-C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	-178.2(15)
C(18A)	-C(13A)	-C(14A)	-C(19A)	-16(3)
Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-C(11A)	68.2(10)
Y(1)	-C(14A)	-C(15A)	-C(20A)	-119.8(10)
C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	-Y(1)	-70.6(11)
C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	-C(11A)	-2.4(16)
C(13A)	-C(14A)	-C(15A)	-C(20A)	169.6(13)
C(19A)	-C(14A)	-C(15A)	-Y(1)	126.0(11)
C(19A)	-C(14A)	-C(15A)	-C(11A)	-165.8(12)
C(19A)	-C(14A)	-C(15A)	-C(20A)	6.2(17)
O(1)	-C(21)	-C(21)a	-O(1)a	163.1(6)
O(2)	-C(22)	-C(23)	-C(24)	-8.8(11)
C(22)	-C(23)	-C(24)	-C(25)	-7.6(11)
C(23)	-C(24)	-C(25)	-O(2)	21.6(10)
C(26)b	-O(3)	-C(26)	-C(27)	11(2)
O(3)	-C(26)	-C(27)	-C(27)b	-28(2)
C(26)	-C(27)	-C(27)b	-C(26)b	35(2)

Table S7 - Torsion Angles (Degrees) (continued)
for: S1037A MOKA 60KV150MA LNT MON 240194

C(8)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	170.8(7)
C(8)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	2.3(12)
Y(1)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	-67.0(5)
Y(1)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	120.5(8)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-Y(1)	67.3(5)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	0.3(9)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	-172.2(7)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-Y(1)	-125.0(7)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	168.0(7)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	-4.5(12)
Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	74.2(15)
Y(1)	-C(11A)	-C(12A)	-C(17A)	-118.2(17)
C(15A)	-C(11A)	-C(12A)	-Y(1)	-67.2(9)
C(15A)	-C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	7.0(19)
C(15A)	-C(11A)	-C(12A)	-C(17A)	174.6(16)
C(16A)	-C(11A)	-C(12A)	-Y(1)	112.9(16)
C(16A)	-C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	-172.9(17)
C(16A)	-C(11A)	-C(12A)	-C(17A)	-5(3)
Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-C(14A)	-66.8(9)
Y(1)	-C(11A)	-C(15A)	-C(20A)	120.9(10)
C(12A)	-C(11A)	-C(15A)	-Y(1)	64.1(10)
C(12A)	-C(11A)	-C(15A)	-C(14A)	-2.7(16)
C(12A)	-C(11A)	-C(15A)	-C(20A)	-175.0(11)
C(16A)	-C(11A)	-C(15A)	-Y(1)	-116.0(17)
C(16A)	-C(11A)	-C(15A)	-C(14A)	177.2(15)
C(16A)	-C(11A)	-C(15A)	-C(20A)	5(2)
Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-C(14A)	65.8(14)
Y(1)	-C(12A)	-C(13A)	-C(18A)	-109(2)
C(11A)	-C(12A)	-C(13A)	-Y(1)	-74.7(13)

L 2317-m16

Table I. Hydrogen Atom Positions and Isotropic Thermal Parameters for (Cp*₂Y)₂(μ-OCH₂CH₂O)(THF)₂ (8).

Atom	x	y	z	U(iso) [Ang ²]
H(61)	0.1452(4)	-0.0879(16)	0.196(3)	0.1010
H(62)	0.0955(16)	-0.051(3)	0.1361(10)	0.1010
H(63)	0.1004(17)	-0.0071(14)	0.222(2)	0.1010
H(71)	0.2190(17)	0.161(4)	0.2997(10)	0.1280
H(72)	0.186(3)	0.0636(7)	0.3076(7)	0.1280
H(73)	0.1477(15)	0.154(4)	0.2868(5)	0.1280
H(81)	0.3206(16)	0.1905(6)	0.189(5)	0.1740
H(82)	0.2675(14)	0.260(4)	0.211(3)	0.1740
H(83)	0.297(3)	0.262(4)	0.1252(13)	0.1740
H(91)	0.2678(17)	0.102(4)	-0.0485(11)	0.1340
H(92)	0.3200(6)	0.114(4)	0.0152(16)	0.1340
H(93)	0.280(2)	0.2007(8)	-0.010(3)	0.1340
H(101)	0.196(2)	-0.012(3)	-0.0437(12)	0.1310
H(102)	0.1318(5)	-0.030(3)	-0.004(3)	0.1310
H(103)	0.189(3)	-0.0901(10)	0.0213(17)	0.1310
*H(161)	-0.050(3)	0.274(4)	0.044(10)	0.2440
*H(162)	-0.0354(14)	0.168(9)	0.057(8)	0.2440
*H(163)	-0.0605(18)	0.202(13)	-0.0259(18)	0.2440
*H(164)	0.181(5)	0.400(3)	-0.089(10)	0.1090
*H(165)	0.185(5)	0.306(11)	-0.136(5)	0.1090
*H(166)	0.2212(12)	0.318(12)	-0.056(6)	0.1090
*H(171)	0.022(12)	0.395(3)	0.093(8)	0.3610
*H(172)	0.008(10)	0.435(11)	0.008(9)	0.3610
*H(173)	0.073(3)	0.451(8)	0.047(16)	0.3610
*H(174)	0.081(8)	0.141(14)	-0.166(10)	0.1720
*H(175)	0.112(13)	0.082(3)	-0.098(4)	0.1720
*H(176)	0.151(6)	0.153(12)	-0.148(13)	0.1720
*H(181)	0.175(5)	0.414(7)	-0.001(3)	0.1950
*H(182)	0.159(3)	0.422(7)	-0.092(6)	0.1950
*H(183)	0.2061(18)	0.3471(14)	-0.063(9)	0.1950
*H(184)	-0.003(6)	0.097(9)	0.020(8)	0.1240
*H(185)	-0.003(6)	0.108(11)	-0.074(6)	0.1240
*H(186)	-0.0459(13)	0.172(2)	-0.021(13)	0.1240

L 2317.m17

*H(191)	0.152(2)	0.194(5)	-0.1814(7)	0.1030
*H(192)	0.165(3)	0.1098(10)	-0.124(4)	0.1030
*H(193)	0.2050(10)	0.201(5)	-0.119(3)	0.1030
*H(194)	-0.054(2)	0.340(11)	0.032(3)	0.0850
*H(195)	-0.008(3)	0.399(5)	0.085(8)	0.0850
*H(196)	-0.024(5)	0.295(7)	0.108(6)	0.0850
*H(201)	0.0784(14)	0.038(2)	-0.080(5)	0.1220
*H(202)	0.031(4)	0.0879(15)	-0.136(2)	0.1220
*H(203)	0.011(3)	0.058(3)	-0.050(4)	0.1220
*H(204)	0.087(5)	0.462(3)	0.080(3)	0.0610
*H(205)	0.079(5)	0.4945(13)	-0.009(5)	0.0610
*H(206)	0.1440(12)	0.465(3)	0.022(7)	0.0610
H(211)	-0.0192(4)	0.0894(5)	0.1886(4)	0.0590
H(212)	-0.0298(4)	0.1977(5)	0.1893(4)	0.0590
H(221)	0.1725(4)	0.4522(6)	0.1277(7)	0.1140
H(222)	0.2257(4)	0.3852(6)	0.1560(7)	0.1140
H(231)	0.1798(5)	0.5211(8)	0.2391(6)	0.1410
H(232)	0.2249(5)	0.4439(8)	0.2720(6)	0.1410
H(241)	0.1509(5)	0.3764(8)	0.3371(5)	0.1280
H(242)	0.1084(5)	0.4618(8)	0.3141(5)	0.1280
H(251)	0.0885(4)	0.2976(6)	0.2628(5)	0.0830
H(252)	0.0664(4)	0.3874(6)	0.2165(5)	0.0830
H(261)	0.0418(11)	0.5965(9)	0.1521(9)	0.2910
H(262)	-0.0297(11)	0.6142(9)	0.1507(9)	0.2910
H(271)	-0.0020(8)	0.7479(9)	0.1765(6)	0.1880
H(272)	0.0590(8)	0.7142(9)	0.2187(6)	0.1880

The Temperature Factor has the Form of $\text{Exp}(-T)$ Where $T = 8(\pi^2)U(\sin(\theta)/\lambda)^2$ for Isotropic Atoms

L2317.m18

```
*****
*
*      O M E G A      *
*      = = = = =      *
*
*****
```

REF. VERSION: 87/11/11.

DATE: 88/06/17. - TIME: 14.09.09.

REF: CP055 P-1 M.BOOY.

THE SPACEGROUP AND CELL CONSTANTS ARE:

FOR P-1

A	=	13.399(2)
B	=	14.864(4)
C	=	15.812(6)
ALPHA=		70.75(2)
BETA =		85.15(2)
GAMMA=		63.78(2)

L2317-m19

TABLE I. FINAL FRACTIONAL ATOMIC COORDINATES AND EQUIVALENT ISOTROPIC THERMAL PARAMETERS FOR NON-H ATOMS WITH E.S.D.'S IN PARENTHESES.

FOR: CPO55 P-1 M.BOOY.

RESIDUE: 1.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	UEQ(A**2)*
Co(1)	.17242(3)	.22134(2)	.31961(2)	.0125(1)
Co(2)	.27758(3)	.47499(3)	.24100(2)	.0134(1)
O(1)	-.0025(3)	.2856(3)	.4096(3)	.022(1)
O(2)	.1310(3)	.6270(3)	.1134(3)	.022(1)
O(3)	.2189(3)	.3524(3)	.2783(3)	.017(1)
C(1) [#]	.1139(5)	.2854(5)	.1349(4)	.017(2)
C(2)	.0090(5)	.3132(5)	.1735(4)	.016(2)
C(3)	-.0008(5)	.2200(5)	.2221(4)	.019(2)
C(4)	.0975(5)	.1331(5)	.2132(4)	.020(2)
C(5)	.1700(5)	.1725(5)	.1609(4)	.017(2)
C(6)	.1525(5)	.3619(5)	.0745(4)	.020(2)
C(7)	-.0802(5)	.4239(5)	.1636(4)	.023(2)
C(8)	-.1033(5)	.2128(5)	.2608(5)	.028(2)
C(9)	.1115(6)	.0206(5)	.2392(5)	.032(3)
C(10)	.2777(5)	.1093(5)	.1289(5)	.026(2)
C(11)	.2422(5)	.0300(5)	.4756(4)	.020(2)
C(12)	.3151(5)	-.0019(5)	.4104(4)	.020(2)
C(13)	.3828(5)	.0517(5)	.3930(4)	.020(2)
C(14)	.3546(5)	.1148(5)	.4494(4)	.021(2)
C(15)	.2660(5)	.1024(5)	.5006(4)	.022(2)
C(16)	.1675(5)	-.0207(5)	.5223(5)	.029(3)
C(17)	.3359(5)	-.0954(5)	.3829(5)	.029(2)
C(18)	.4816(5)	.0293(5)	.3363(5)	.024(2)
C(19)	.4148(5)	.1758(5)	.4572(5)	.024(2)
C(20)	.2149(5)	.1483(5)	.5728(5)	.027(2)
C(21)	.3940(5)	.4630(5)	.0836(4)	.021(2)
C(22)	.4413(5)	.3570(5)	.1438(4)	.020(2)
C(23)	.5049(5)	.3516(5)	.2137(4)	.018(2)
C(24)	.4990(5)	.4534(5)	.1983(4)	.022(2)
C(25)	.4297(5)	.5222(5)	.1173(4)	.022(2)
C(26)	.3276(5)	.5021(5)	-.0033(5)	.026(2)
C(27)	.4359(5)	.2649(5)	.1304(5)	.025(2)
C(28)	.5834(5)	.2523(5)	.2843(5)	.030(2)
C(29)	.5757(6)	.4735(5)	.2452(5)	.030(2)
C(30)	.4097(5)	.6357(5)	.0734(5)	.029(2)
C(31)	.2118(5)	.4961(5)	.4093(4)	.017(2)
C(32)	.3147(5)	.5040(5)	.4035(4)	.022(2)
C(33)	.2968(5)	.6017(5)	.3397(4)	.022(2)
C(34)	.1848(5)	.6574(5)	.3053(4)	.021(2)
C(35)	.1309(5)	.5916(5)	.3482(4)	.019(2)
C(36)	.1872(5)	.4101(5)	.4708(4)	.020(2)
C(37)	.4188(6)	.4243(5)	.4612(5)	.029(2)
C(38)	.3759(6)	.6527(6)	.3249(5)	.034(3)
C(39)	.1272(6)	.7703(5)	.2474(5)	.034(3)
C(40)	.0090(5)	.6241(5)	.3341(5)	.026(2)
C(41)	-.0655(5)	.3953(5)	.4064(5)	.025(2)
C(42)	-.1853(5)	.4138(5)	.4028(5)	.030(2)
C(43)	-.1801(6)	.3087(6)	.4642(5)	.034(3)
C(44)	-.0585(6)	.2284(5)	.4699(5)	.030(2)
C(45)	.0261(6)	.6260(6)	.0977(5)	.032(3)
C(46)	-.0578(5)	.7394(5)	.0749(5)	.032(3)
C(47)	.0056(6)	.7985(6)	.0200(5)	.041(3)
C(48)	.1263(6)	.7241(5)	.0479(5)	.032(3)

-4-

L2317-m20

RESIDUE: 2.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	UEQ(A**2)*
O(4)	.4632(9)	.173(1)	.8151(8)	.171(6)
C(49)	.3786(9)	.259(1)	.7382(9)	.115(6)
C(50)	.278(1)	.306(1)	.767(1)	.22(1)
C(51)	.313(1)	.280(1)	.862(1)	.23(2)
C(52)	.413(1)	.205(1)	.8914(9)	.17(1)

RESIDUE: 3.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	UEQ(A**2)*
O(5)	.699(1)	-.004(1)	.085(1)	.25(1)
C(53)	.748(1)	-.021(1)	.1693(9)	.16(1)
C(54)	.796(1)	.043(2)	.158(1)	.32(2)
C(55)	.828(1)	.066(1)	.076(1)	.24(1)
C(56)	.749(1)	.0636(9)	.026(1)	.16(1)

L 2317-m21

-HYDROGEN- PARAMETERS:

RESIDUE: 1.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	Ueq(A**2)*
H(61)	.193(4)	.385(4)	.108(4)	.0138(1)
H(62)	.197(4)	.336(4)	.036(4)	.0138(1)
H(63)	.098(4)	.424(4)	.032(4)	.0138(1)
H(71)	-.082(4)	.477(4)	.119(4)	.0138(1)
H(72)	-.078(4)	.462(4)	.200(4)	.0138(1)
H(73)	-.151(4)	.427(4)	.188(4)	.0138(1)
H(81)	-.083(4)	.144(4)	.300(4)	.0138(1)
H(82)	-.162(4)	.228(4)	.202(4)	.0138(1)
H(83)	-.147(4)	.261(4)	.278(4)	.0138(1)
H(91)	.183(4)	-.030(4)	.231(4)	.0138(1)
H(92)	.085(4)	.002(4)	.308(4)	.0138(1)
H(93)	.058(4)	.020(4)	.206(4)	.0138(1)
H(101)	.320(4)	.065(4)	.170(4)	.0138(1)
H(102)	.273(4)	.059(4)	.091(4)	.0138(1)
H(103)	.294(4)	.144(4)	.079(4)	.0138(1)
H(161)	.113(4)	.021(4)	.562(4)	.0138(1)
H(162)	.213(4)	-.091(4)	.558(4)	.0138(1)
H(163)	.115(4)	-.013(4)	.474(4)	.0138(1)
H(171)	.271(4)	-.114(4)	.384(4)	.0138(1)
H(172)	.360(4)	-.094(4)	.321(4)	.0138(1)
H(173)	.395(4)	-.164(4)	.420(4)	.0138(1)
H(181)	.508(4)	-.034(4)	.317(4)	.0138(1)
H(182)	.478(4)	.078(4)	.286(4)	.0138(1)
H(183)	.543(4)	.030(4)	.369(4)	.0138(1)
H(191)	.401(4)	.239(4)	.400(4)	.0138(1)
H(192)	.496(4)	.131(4)	.454(4)	.0138(1)
H(193)	.393(4)	.196(4)	.509(4)	.0138(1)
H(201)	.193(4)	.100(4)	.616(4)	.0138(1)
H(202)	.267(4)	.158(4)	.596(4)	.0138(1)
H(203)	.146(4)	.195(4)	.564(4)	.0138(1)
H(261)	.341(4)	.547(4)	-.041(4)	.0138(1)
H(262)	.333(4)	.445(4)	-.041(4)	.0138(1)
H(263)	.252(4)	.541(4)	.002(4)	.0138(1)
H(271)	.387(4)	.243(4)	.167(4)	.0138(1)
H(272)	.413(4)	.287(4)	.069(4)	.0138(1)
H(273)	.517(4)	.201(4)	.150(4)	.0138(1)
H(281)	.570(4)	.193(4)	.295(4)	.0138(1)
H(282)	.584(4)	.265(4)	.345(4)	.0138(1)
H(283)	.661(4)	.226(4)	.272(4)	.0138(1)
H(291)	.585(4)	.437(4)	.313(4)	.0138(1)
H(292)	.565(4)	.543(4)	.227(4)	.0138(1)
H(293)	.659(4)	.432(4)	.220(4)	.0138(1)
H(301)	.473(4)	.644(4)	.080(4)	.0138(1)
H(302)	.380(4)	.664(4)	.010(4)	.0138(1)
H(303)	.348(4)	.697(4)	.098(4)	.0138(1)
H(361)	.230(4)	.374(4)	.517(4)	.0138(1)
H(362)	.117(4)	.441(4)	.499(4)	.0138(1)
H(363)	.193(4)	.363(4)	.442(4)	.0138(1)
H(371)	.409(4)	.393(4)	.509(4)	.0138(1)
H(372)	.459(4)	.339(4)	.454(4)	.0138(1)
H(373)	.468(4)	.443(4)	.462(4)	.0138(1)
H(381)	.384(4)	.675(4)	.261(4)	.0138(1)
H(382)	.461(4)	.601(4)	.354(4)	.0138(1)
H(383)	.354(4)	.702(4)	.345(4)	.0138(1)
H(391)	.182(4)	.793(4)	.215(4)	.0138(1)
H(392)	.056(4)	.796(4)	.206(4)	.0138(1)
H(393)	.106(4)	.807(4)	.279(4)	.0138(1)

-6-

L2317.m22

H(401)	-.025(4)	.597(4)	.389(4)	.0138(1)
H(402)	-.042(4)	.703(4)	.303(4)	.0138(1)
H(403)	-.009(4)	.588(4)	.314(4)	.0138(1)
H(411)	-.048(4)	.405(4)	.463(4)	.0138(1)
H(412)	-.045(4)	.435(4)	.353(4)	.0138(1)
H(421)	-.236(4)	.476(4)	.417(4)	.0138(1)
H(422)	-.211(4)	.432(4)	.342(4)	.0138(1)
H(431)	-.226(4)	.281(4)	.449(4)	.0138(1)
H(432)	-.200(4)	.316(4)	.518(4)	.0138(1)
H(441)	-.047(4)	.162(4)	.442(4)	.0138(1)
H(442)	-.029(4)	.197(4)	.537(4)	.0138(1)
H(451)	.009(4)	.583(4)	.161(4)	.0138(1)
H(452)	.034(4)	.601(4)	.047(4)	.0138(1)
H(461)	-.080(4)	.762(4)	.122(4)	.0138(1)
H(462)	-.117(4)	.751(4)	.042(4)	.0138(1)
H(471)	-.023(4)	.872(4)	.025(4)	.0138(1)
H(472)	-.011(4)	.816(4)	-.029(4)	.0138(1)
H(481)	.163(4)	.750(4)	.079(4)	.0138(1)
H(482)	.175(4)	.699(4)	.003(4)	.0138(1)

-7-

RESIDUE: 2.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	UEQ(A**2)*
H(491)	.4054(9)	.313(1)	.7070(9)	.0138(1)
H(492)	.3702(9)	.226(1)	.6946(9)	.0138(1)
H(501)	.239(1)	.385(1)	.736(1)	.0138(1)
H(502)	.227(1)	.274(1)	.763(1)	.0138(1)
H(511)	.310(1)	.346(1)	.868(1)	.0138(1)
H(512)	.258(1)	.260(1)	.901(1)	.0138(1)
H(521)	.458(1)	.232(1)	.9157(9)	.0138(1)
H(522)	.408(1)	.144(1)	.9396(9)	.0138(1)

L 2317-m23

RESIDUE: 3.

ATOM	X/A	Y/B	Z/C	UEQ(A**2)*
H(531)	.691(1)	-.009(1)	.2146(9)	.0138(1)
H(532)	.805(1)	-.097(1)	.1897(9)	.0138(1)
H(541)	.747(1)	.105(2)	.177(1)	.0138(1)
H(542)	.867(1)	.000(2)	.197(1)	.0138(1)
H(551)	.818(1)	.141(1)	.058(1)	.0138(1)
H(552)	.906(1)	.019(1)	.066(1)	.0138(1)
H(561)	.690(1)	.1365(9)	-.004(1)	.0138(1)
H(562)	.788(1)	.0301(9)	-.020(1)	.0138(1)

L2317-ma4

TABLE II. THERMAL PARAMETERS WITH E.S.D.'S IN PARENTHESES.
FOR: CP055 P-1 M.BOOY.

RESIDUE: 1. ATOM	U(1,1)/UISO	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
Oe(1)	.0106(2)	.0134(2)	.0122(2)	-.0029(2)	.0003(2)	-.0050(2)
Oe(2)	.0113(2)	.0172(2)	.0135(2)	-.0057(2)	.0033(2)	-.0078(2)
O(1)	.016(2)	.024(2)	.024(3)	-.007(2)	.006(2)	-.008(2)
O(2)	.021(2)	.028(2)	.021(3)	-.009(2)	-.002(2)	-.012(2)
O(3)	.017(2)	.019(2)	.020(2)	-.007(2)	.001(2)	-.011(2)
C(1) [#]	.024(4)	.026(3)	.012(3)	-.012(3)	-.002(3)	-.016(3)
C(2)	.013(3)	.022(3)	.013(3)	-.006(3)	-.005(3)	-.006(3)
C(3)	.019(3)	.024(3)	.017(4)	-.005(3)	-.001(3)	-.013(3)
C(4)	.027(4)	.021(3)	.018(4)	-.010(3)	-.002(3)	-.013(3)
C(5)	.018(3)	.023(3)	.013(3)	-.009(3)	-.001(3)	-.008(3)
C(6)	.017(3)	.029(4)	.013(4)	-.008(3)	.004(3)	-.010(3)
C(7)	.024(4)	.024(3)	.018(4)	-.006(3)	.004(3)	-.010(3)
C(8)	.025(4)	.034(4)	.031(4)	-.011(4)	.007(3)	-.018(3)
C(9)	.027(4)	.025(4)	.043(5)	-.006(4)	-.007(4)	-.013(3)
C(10)	.028(4)	.020(3)	.024(4)	-.006(3)	-.002(3)	-.005(3)
C(11)	.015(3)	.015(3)	.023(4)	.003(3)	-.005(3)	-.006(3)
C(12)	.016(3)	.014(3)	.021(4)	-.001(3)	-.006(3)	-.001(3)
C(13)	.009(3)	.015(3)	.019(4)	.005(3)	.001(3)	.001(3)
C(14)	.013(3)	.018(3)	.022(4)	.004(3)	-.006(3)	-.005(3)
C(15)	.015(3)	.022(3)	.014(4)	.009(3)	.001(3)	-.005(3)
C(16)	.023(4)	.022(4)	.037(5)	.001(3)	.001(3)	-.012(3)
C(17)	.026(4)	.018(3)	.036(5)	-.007(3)	-.004(3)	-.004(3)
C(18)	.022(4)	.023(4)	.023(4)	-.008(3)	.001(3)	-.007(3)
C(19)	.021(4)	.021(3)	.023(4)	-.001(3)	-.003(3)	-.007(3)
C(20)	.026(4)	.030(4)	.020(4)	-.003(3)	.004(3)	-.013(3)
C(21)	.014(3)	.032(4)	.020(4)	-.011(3)	.009(3)	-.012(3)
C(22)	.013(3)	.025(3)	.023(4)	-.012(3)	.009(3)	-.008(3)
C(23)	.013(3)	.026(3)	.019(4)	-.010(3)	.007(3)	-.010(3)
C(24)	.016(3)	.037(4)	.021(4)	-.014(3)	.007(3)	-.017(3)
C(25)	.015(3)	.027(4)	.020(4)	-.006(3)	.008(3)	-.008(3)
C(26)	.022(4)	.033(4)	.022(4)	-.007(3)	.003(3)	-.012(3)
C(27)	.022(4)	.029(4)	.026(4)	-.011(3)	.004(3)	-.013(3)
C(28)	.018(4)	.034(4)	.033(4)	-.005(4)	.000(3)	-.010(3)
C(29)	.026(4)	.039(4)	.031(4)	-.011(4)	.002(3)	-.021(3)
C(30)	.025(4)	.032(4)	.032(4)	-.009(4)	.009(3)	-.016(3)
C(31)	.022(3)	.026(3)	.012(3)	-.012(3)	.006(3)	-.014(3)
C(32)	.023(4)	.029(4)	.022(4)	-.016(3)	.006(3)	-.014(3)
C(33)	.027(4)	.031(4)	.021(4)	-.016(3)	.008(3)	-.020(3)
C(34)	.035(4)	.018(3)	.021(4)	-.016(3)	.007(3)	-.016(3)
C(35)	.022(3)	.020(3)	.020(4)	-.011(3)	.006(3)	-.010(3)
C(36)	.025(4)	.023(3)	.017(4)	-.012(3)	.003(3)	-.010(3)
C(37)	.029(4)	.037(4)	.026(4)	-.007(4)	-.002(3)	-.021(3)
C(38)	.042(5)	.040(4)	.038(5)	-.022(4)	.013(4)	-.028(4)
C(39)	.047(5)	.024(4)	.038(5)	-.017(4)	.009(4)	-.019(4)
C(40)	.020(4)	.027(4)	.031(4)	-.008(3)	.005(3)	-.011(3)
C(41)	.023(4)	.027(4)	.027(4)	-.009(3)	.002(3)	-.013(3)
C(42)	.017(4)	.039(4)	.031(4)	-.023(4)	-.001(3)	-.002(3)
C(43)	.030(4)	.050(5)	.034(5)	-.024(4)	.016(4)	-.024(4)
C(44)	.029(4)	.035(4)	.029(4)	-.007(4)	.007(3)	-.019(3)
C(45)	.023(4)	.038(4)	.034(5)	-.008(4)	.001(4)	-.014(3)
C(46)	.021(4)	.037(4)	.037(5)	-.022(4)	-.007(3)	-.004(3)
C(47)	.042(5)	.036(4)	.034(5)	.005(4)	-.018(4)	-.016(4)
C(48)	.031(4)	.030(4)	.036(5)	-.012(4)	.006(4)	-.014(3)

-9-

L2317.m25

RESIDUE: 2.						
ATOM	U(1,1)/UIISO	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
O(4)	.15(1)	.22(1)	.14(1)	-.07(1)	.042(9)	-.077(9)
C(49)	.11(1)	.12(1)	.11(1)	-.01(1)	-.043(9)	-.057(9)
C(50)	.073(9)	.078(9)	.38(3)	.08(1)	-.03(1)	-.030(8)
C(51)	.068(9)	.34(3)	.42(4)	-.33(3)	.13(2)	-.08(1)
C(52)	.32(2)	.25(2)	.08(1)	-.09(1)	.07(1)	-.23(2)

RESIDUE: 3.						
ATOM	U(1,1)/UIISO	U(2,2)	U(3,3)	U(2,3)	U(1,3)	U(1,2)
O(5)	.40(2)	.21(1)	.19(2)	-.09(1)	.09(2)	-.18(2)
C(53)	.20(2)	.24(2)	.056(9)	-.05(1)	.04(1)	-.11(2)
C(54)	.13(1)	.60(4)	.56(5)	-.53(4)	.20(2)	-.24(2)
C(55)	.082(9)	.12(1)	.44(4)	.07(2)	-.05(2)	-.088(9)
C(56)	.22(2)	.037(7)	.17(2)	-.004(9)	-.01(2)	-.036(9)

#) Non-positive definite temperature factors.

*) THE TEMPERATURE FACTOR HAS THE FORM OF $\exp(-T)$

WHERE

$T = 8 \cdot (\pi^2) \cdot \text{UIISO} \cdot (\sin(\theta) / \lambda)^2$, FOR ISOTROPIC ATOMS,

$T = 2 \cdot (\pi^2) \cdot (\sum(I, J) (H(I) \cdot H(J) \cdot U_{IJ} \cdot \text{ASTAR}(I) \cdot \text{ASTAR}(J)))$, FOR ANISOIR. ATOMS

$U_{EQ} = 1/3 \sum(I, J) (U_{IJ} \cdot \text{ASTAR}(I) \cdot \text{ASTAR}(J) \cdot A(I) \cdot A(J))$

ASTAR(I) ARE RECIPROCAL AXIAL LENGTHS AND H(I) ARE MILLER INDICES.

L2317.m26

DATA ON THE GEOMETRY OF: CP055 P-1 M.BOOY.

TABLE III. BOND DISTANCES (ANG.) FOR: CP055 P-1 M.BOOY.

Oe(1)	-O(1)	2.605(5)	C(11)	-C(12)	1.409(9)
Oe(1)	-O(3)	2.185(4)	C(11)	-C(15)	1.42(1)
Oe(1)	-C(1)	2.819(6)	C(11)	-C(16)	1.51(1)
Oe(1)	-C(2)	2.851(7)	C(12)	-C(13)	1.41(1)
Oe(1)	-C(3)	2.904(7)	C(12)	-C(17)	1.49(1)
Oe(1)	-C(4)	2.909(7)	C(13)	-C(14)	1.414(9)
Oe(1)	-C(5)	2.839(6)	C(13)	-C(18)	1.51(1)
Oe(1)	-C(11)	2.909(6)	C(14)	-C(15)	1.43(1)
Oe(1)	-C(12)	2.906(7)	C(14)	-C(19)	1.49(1)
Oe(1)	-C(13)	2.827(7)	C(15)	-C(20)	1.49(1)
Oe(1)	-C(14)	2.822(7)	C(21)	-C(22)	1.422(9)
Oe(1)	-C(15)	2.863(6)	C(21)	-C(25)	1.42(1)
Oe(2)	-O(3)	2.183(5)	C(21)	-C(26)	1.50(1)
Oe(2)	-O(2)	2.603(5)	C(22)	-C(23)	1.412(9)
Oe(2)	-C(21)	2.837(7)	C(22)	-C(27)	1.49(1)
Oe(2)	-C(22)	2.839(7)	C(23)	-C(24)	1.42(1)
Oe(2)	-C(23)	2.862(7)	C(23)	-C(28)	1.51(1)
Oe(2)	-C(24)	2.885(7)	C(24)	-C(25)	1.431(9)
Oe(2)	-C(25)	2.856(7)	C(24)	-C(29)	1.50(1)
Oe(2)	-C(31)	2.805(6)	C(25)	-C(30)	1.50(1)
Oe(2)	-C(32)	2.859(6)	C(31)	-C(32)	1.43(1)
Oe(2)	-C(35)	2.847(7)	C(31)	-C(35)	1.427(9)
O(1)	-C(41)	1.453(8)	C(31)	-C(36)	1.48(1)
O(1)	-C(44)	1.450(9)	C(32)	-C(33)	1.397(9)
O(2)	-C(45)	1.46(1)	C(32)	-C(37)	1.49(1)
O(2)	-C(48)	1.451(9)	C(33)	-C(34)	1.41(1)
C(1)	-C(2)	1.42(1)	C(33)	-C(38)	1.52(1)
C(1)	-C(5)	1.43(1)	C(34)	-C(35)	1.43(1)
C(1)	-C(6)	1.48(1)	C(34)	-C(39)	1.49(1)
C(2)	-C(3)	1.40(1)	C(35)	-C(40)	1.50(1)
C(2)	-C(7)	1.51(1)	C(41)	-C(42)	1.51(1)
C(3)	-C(4)	1.42(1)	C(42)	-C(43)	1.52(1)
C(3)	-C(8)	1.49(1)	C(43)	-C(44)	1.52(1)
C(4)	-C(5)	1.42(1)	C(45)	-C(46)	1.49(1)
C(4)	-C(9)	1.51(1)	C(46)	-C(47)	1.51(1)
C(5)	-C(10)	1.49(1)	C(47)	-C(48)	1.50(1)

-11-

L 2317-may

-HYDROGEN- PARAMETERS:

C(6)	-H(61)	1.01(6)	C(28)	-H(283)	.96(6)
C(6)	-H(62)	.87(6)	C(29)	-H(291)	1.02(6)
C(6)	-H(63)	.96(6)	C(29)	-H(292)	.92(6)
C(7)	-H(71)	.86(6)	C(29)	-H(293)	1.12(6)
C(7)	-H(72)	.94(6)	C(30)	-H(301)	.93(6)
C(7)	-H(73)	.98(6)	C(30)	-H(302)	.99(6)
C(8)	-H(81)	.93(6)	C(30)	-H(303)	1.09(6)
C(8)	-H(82)	1.17(6)	C(36)	-H(361)	.83(6)
C(8)	-H(83)	.81(6)	C(36)	-H(362)	.99(6)
C(9)	-H(91)	.95(6)	C(36)	-H(363)	.93(6)
C(9)	-H(92)	1.10(6)	C(37)	-H(371)	.78(6)
C(9)	-H(93)	.93(6)	C(37)	-H(372)	1.18(6)
C(10)	-H(101)	.79(6)	C(37)	-H(373)	.82(6)
C(10)	-H(102)	1.12(6)	C(38)	-H(381)	.97(6)
C(10)	-H(103)	.86(6)	C(38)	-H(382)	1.09(6)
C(16)	-H(161)	1.04(6)	C(38)	-H(383)	.82(6)
C(16)	-H(162)	.94(6)	C(39)	-H(391)	.98(6)
C(16)	-H(163)	1.03(6)	C(39)	-H(392)	1.05(6)
C(17)	-H(171)	1.02(6)	C(39)	-H(393)	.80(6)
C(17)	-H(172)	1.00(6)	C(40)	-H(401)	.99(6)
C(17)	-H(173)	.99(6)	C(40)	-H(402)	1.03(6)
C(18)	-H(181)	.99(6)	C(40)	-H(403)	.83(6)
C(18)	-H(182)	.87(6)	C(41)	-H(411)	1.01(6)
C(18)	-H(183)	1.01(6)	C(41)	-H(412)	.96(6)
C(19)	-H(191)	1.02(6)	C(42)	-H(421)	.96(6)
C(19)	-H(192)	1.00(6)	C(42)	-H(422)	.96(6)
C(19)	-H(193)	.94(6)	C(43)	-H(431)	.96(6)
C(20)	-H(201)	.95(6)	C(43)	-H(432)	.90(6)
C(20)	-H(202)	.90(6)	C(44)	-H(441)	1.15(6)
C(20)	-H(203)	.86(6)	C(44)	-H(442)	1.04(6)
C(26)	-H(261)	.81(6)	C(45)	-H(451)	1.06(6)
C(26)	-H(262)	1.16(6)	C(45)	-H(452)	.97(6)
C(26)	-H(263)	.93(6)	C(46)	-H(461)	.89(6)
C(27)	-H(271)	.93(6)	C(46)	-H(462)	.91(6)
C(27)	-H(272)	.95(6)	C(47)	-H(471)	1.01(6)
C(27)	-H(273)	1.06(6)	C(47)	-H(472)	.75(6)
C(28)	-H(281)	.93(6)	C(48)	-H(481)	.98(6)
C(28)	-H(282)	1.04(6)	C(48)	-H(482)	.97(6)

L 2317.m28

TABLE IV. ANGLES (DEG.) FOR: CPO55 P-1 M.BOOY.

O(1)	-Ce(1)	-O(3)	103.9(2)	C(41)	-O(1)	-C(44)	105.5(5)
O(1)	-Ce(1)	-C(1)	111.7(2)	Ce(2)	-O(2)	-C(45)	120.9(4)
O(1)	-Ce(1)	-C(2)	82.9(2)	Ce(2)	-O(2)	-C(48)	133.7(4)
O(1)	-Ce(1)	-C(3)	76.2(2)	C(45)	-O(2)	-C(48)	105.4(5)
O(1)	-Ce(1)	-C(4)	99.8(2)	Ce(1)	-O(3)	-Ce(2)	175.9(2)
O(1)	-Ce(1)	-C(5)	123.6(2)	Ce(1)	-C(1)	-C(2)	76.7(4)
O(1)	-Ce(1)	-C(11)	82.4(2)	Ce(1)	-C(1)	-C(5)	76.2(3)
O(3)	-Ce(1)	-C(1)	83.8(2)	Ce(1)	-C(1)	-C(6)	116.0(4)
O(3)	-Ce(1)	-C(2)	94.4(2)	C(2)	-C(1)	-C(5)	107.5(6)
O(3)	-Ce(1)	-C(3)	122.6(2)	C(2)	-C(1)	-C(6)	125.1(6)
O(3)	-Ce(1)	-C(4)	130.6(2)	C(5)	-C(1)	-C(6)	127.3(6)
O(3)	-Ce(1)	-C(5)	105.0(2)	Ce(1)	-C(2)	-C(1)	74.2(4)
O(3)	-Ce(1)	-C(11)	132.2(2)	Ce(1)	-C(2)	-C(3)	78.0(4)
C(1)	-Ce(1)	-C(2)	29.1(2)	Ce(1)	-C(2)	-C(7)	115.4(4)
C(1)	-Ce(1)	-C(3)	47.4(2)	C(1)	-C(2)	-C(3)	108.8(6)
C(1)	-Ce(1)	-C(4)	47.1(2)	C(1)	-C(2)	-C(7)	126.9(6)
C(1)	-Ce(1)	-C(5)	29.2(2)	C(3)	-C(2)	-C(7)	124.3(6)
C(1)	-Ce(1)	-C(11)	138.6(2)	Ce(1)	-C(3)	-C(2)	73.8(4)
C(2)	-Ce(1)	-C(3)	28.2(2)	Ce(1)	-C(3)	-C(4)	76.1(4)
C(2)	-Ce(1)	-C(4)	46.5(2)	Ce(1)	-C(3)	-C(8)	125.0(4)
C(2)	-Ce(1)	-C(5)	47.6(2)	C(2)	-C(3)	-C(4)	107.6(6)
C(2)	-Ce(1)	-C(11)	133.2(2)	C(2)	-C(3)	-C(8)	126.5(6)
C(3)	-Ce(1)	-C(4)	28.2(2)	C(4)	-C(3)	-C(8)	124.9(6)
C(3)	-Ce(1)	-C(5)	47.3(2)	Ce(1)	-C(4)	-C(3)	75.7(4)
C(3)	-Ce(1)	-C(11)	105.0(2)	Ce(1)	-C(4)	-C(5)	73.0(4)
C(4)	-Ce(1)	-C(5)	28.6(2)	Ce(1)	-C(4)	-C(9)	126.8(4)
C(4)	-Ce(1)	-C(11)	93.2(2)	C(3)	-C(4)	-C(5)	108.8(6)
C(5)	-Ce(1)	-C(11)	110.2(2)	C(3)	-C(4)	-C(9)	124.6(7)
O(3)	-Ce(2)	-O(2)	103.0(2)	C(5)	-C(4)	-C(9)	125.6(6)
O(3)	-Ce(2)	-C(21)	107.5(2)	Ce(1)	-C(5)	-C(1)	74.6(4)
O(3)	-Ce(2)	-C(22)	88.1(2)	Ce(1)	-C(5)	-C(4)	78.4(4)
O(3)	-Ce(2)	-C(23)	99.6(2)	Ce(1)	-C(5)	-C(10)	119.0(5)
O(3)	-Ce(2)	-C(24)	128.1(2)	C(1)	-C(5)	-C(4)	107.2(6)
O(3)	-Ce(2)	-C(25)	134.6(2)	C(1)	-C(5)	-C(10)	125.8(6)
O(3)	-Ce(2)	-C(31)	85.0(2)	C(4)	-C(5)	-C(10)	126.5(6)
O(2)	-Ce(2)	-C(21)	76.9(2)	Ce(1)	-C(11)	-C(12)	75.9(4)
O(2)	-Ce(2)	-C(22)	102.2(2)	Ce(1)	-C(11)	-C(15)	74.0(4)
O(2)	-Ce(2)	-C(23)	124.1(2)	Ce(1)	-C(11)	-C(16)	124.9(5)
O(2)	-Ce(2)	-C(24)	110.5(2)	C(12)	-C(11)	-C(15)	108.4(6)
O(2)	-Ce(2)	-C(25)	82.2(2)	C(12)	-C(11)	-C(16)	124.5(6)
O(2)	-Ce(2)	-C(31)	110.9(2)	C(15)	-C(11)	-C(16)	126.2(6)
C(21)	-Ce(2)	-C(22)	29.0(2)	Ce(1)	-C(12)	-C(11)	76.1(4)
C(21)	-Ce(2)	-C(23)	47.5(2)	Ce(1)	-C(12)	-C(13)	72.7(4)
C(21)	-Ce(2)	-C(24)	47.8(2)	Ce(1)	-C(12)	-C(17)	128.8(4)
C(21)	-Ce(2)	-C(25)	28.8(2)	C(11)	-C(12)	-C(13)	108.1(6)
C(21)	-Ce(2)	-C(31)	163.9(2)	C(11)	-C(12)	-C(17)	124.8(6)
C(22)	-Ce(2)	-C(23)	28.7(2)	C(13)	-C(12)	-C(17)	125.5(6)
C(22)	-Ce(2)	-C(24)	47.4(2)	Ce(1)	-C(13)	-C(12)	78.9(4)
C(22)	-Ce(2)	-C(25)	47.3(2)	Ce(1)	-C(13)	-C(14)	75.3(4)
C(22)	-Ce(2)	-C(31)	147.0(2)	Ce(1)	-C(13)	-C(18)	120.7(4)
C(23)	-Ce(2)	-C(24)	28.6(2)	C(12)	-C(13)	-C(14)	108.4(6)
C(23)	-Ce(2)	-C(25)	47.1(2)	C(12)	-C(13)	-C(18)	124.7(6)
C(23)	-Ce(2)	-C(31)	121.6(2)	C(14)	-C(13)	-C(18)	126.0(7)
C(24)	-Ce(2)	-C(25)	28.9(2)	Ce(1)	-C(14)	-C(13)	75.7(4)
C(24)	-Ce(2)	-C(31)	116.5(2)	Ce(1)	-C(14)	-C(15)	77.1(4)
C(25)	-Ce(2)	-C(31)	135.9(2)	Ce(1)	-C(14)	-C(19)	117.0(4)
Ce(1)	-O(1)	-C(41)	123.3(4)	C(13)	-C(14)	-C(15)	107.8(6)
Ce(1)	-O(1)	-C(44)	131.2(4)	C(13)	-C(14)	-C(19)	124.7(6)

-13-

L 2317. mag

C(15)	-C(14)	-C(19)	127.3(6)	C(21)	-C(25)	-C(30)	127.4(6)
Oe(1)	-C(15)	-C(11)	77.5(4)	C(24)	-C(25)	-C(30)	123.5(6)
Oe(1)	-C(15)	-C(14)	73.9(4)	Oe(2)	-C(31)	-C(32)	77.5(4)
Oe(1)	-C(15)	-C(20)	118.8(5)	Oe(2)	-C(31)	-C(35)	77.0(4)
C(11)	-C(15)	-C(14)	107.3(6)	Oe(2)	-C(31)	-C(36)	115.1(4)
C(11)	-C(15)	-C(20)	125.9(6)	C(32)	-C(31)	-C(35)	107.6(6)
C(14)	-C(15)	-C(20)	126.5(6)	C(32)	-C(31)	-C(36)	127.9(6)
Oe(2)	-C(21)	-C(22)	75.6(4)	C(35)	-C(31)	-C(36)	124.4(7)
Oe(2)	-C(21)	-C(25)	76.3(4)	Oe(2)	-C(32)	-C(31)	73.3(4)
Oe(2)	-C(21)	-C(26)	118.2(5)	Oe(2)	-C(32)	-C(33)	78.2(4)
C(22)	-C(21)	-C(25)	107.2(6)	Oe(2)	-C(32)	-C(37)	118.0(4)
C(22)	-C(21)	-C(26)	126.1(6)	C(31)	-C(32)	-C(33)	107.7(6)
C(25)	-C(21)	-C(26)	126.5(6)	C(31)	-C(32)	-C(37)	124.9(6)
Oe(2)	-C(22)	-C(21)	75.4(4)	C(33)	-C(32)	-C(37)	127.3(7)
Oe(2)	-C(22)	-C(23)	76.6(4)	C(32)	-C(33)	-C(34)	109.7(6)
Oe(2)	-C(22)	-C(27)	119.6(5)	C(32)	-C(33)	-C(38)	125.5(6)
C(21)	-C(22)	-C(23)	108.3(6)	C(34)	-C(33)	-C(38)	123.2(6)
C(21)	-C(22)	-C(27)	126.0(6)	C(33)	-C(34)	-C(35)	107.3(6)
C(23)	-C(22)	-C(27)	125.4(6)	C(33)	-C(34)	-C(39)	126.8(7)
Oe(2)	-C(23)	-C(22)	74.7(4)	C(35)	-C(34)	-C(39)	125.2(7)
Oe(2)	-C(23)	-C(24)	76.6(4)	Oe(2)	-C(35)	-C(31)	73.7(4)
Oe(2)	-C(23)	-C(28)	123.4(4)	Oe(2)	-C(35)	-C(34)	78.7(4)
C(22)	-C(23)	-C(24)	108.9(6)	Oe(2)	-C(35)	-C(40)	117.1(4)
C(22)	-C(23)	-C(28)	126.5(6)	C(31)	-C(35)	-C(34)	107.7(6)
C(24)	-C(23)	-C(28)	123.8(6)	C(31)	-C(35)	-C(40)	127.8(6)
Oe(2)	-C(24)	-C(23)	74.8(4)	C(34)	-C(35)	-C(40)	124.3(6)
Oe(2)	-C(24)	-C(25)	74.4(4)	O(1)	-C(41)	-C(42)	103.8(6)
Oe(2)	-C(24)	-C(29)	128.4(5)	C(41)	-C(42)	-C(43)	102.8(6)
C(23)	-C(24)	-C(25)	106.7(6)	C(42)	-C(43)	-C(44)	105.3(7)
C(23)	-C(24)	-C(29)	124.0(6)	O(1)	-C(44)	-C(43)	106.1(6)
C(25)	-C(24)	-C(29)	127.4(6)	O(2)	-C(45)	-C(46)	104.3(6)
Oe(2)	-C(25)	-C(21)	74.8(4)	C(45)	-C(46)	-C(47)	102.9(6)
Oe(2)	-C(25)	-C(24)	76.7(4)	C(46)	-C(47)	-C(48)	105.1(6)
Oe(2)	-C(25)	-C(30)	119.4(5)	O(2)	-C(48)	-C(47)	107.4(6)
C(21)	-C(25)	-C(24)	108.9(6)				

L2317.m30

-HYDROGEN- PARAMETERS:

C(1)	-C(6)	-H(61)	113. (3)	C(21)	-C(26)	-H(261)	111. (4)
C(1)	-C(6)	-H(62)	112. (4)	C(21)	-C(26)	-H(262)	122. (3)
C(1)	-C(6)	-H(63)	117. (4)	C(21)	-C(26)	-H(263)	111. (4)
H(61)	-C(6)	-H(62)	108. (5)	H(261)	-C(26)	-H(262)	104. (5)
H(61)	-C(6)	-H(63)	108. (5)	H(261)	-C(26)	-H(263)	101. (6)
H(62)	-C(6)	-H(63)	98. (5)	H(262)	-C(26)	-H(263)	106. (5)
C(2)	-C(7)	-H(71)	120. (4)	C(22)	-C(27)	-H(271)	113. (4)
C(2)	-C(7)	-H(72)	122. (4)	C(22)	-C(27)	-H(272)	106. (4)
C(2)	-C(7)	-H(73)	115. (3)	C(22)	-C(27)	-H(273)	106. (3)
H(71)	-C(7)	-H(72)	86. (5)	H(271)	-C(27)	-H(272)	111. (5)
H(71)	-C(7)	-H(73)	118. (5)	H(271)	-C(27)	-H(273)	107. (5)
H(72)	-C(7)	-H(73)	89. (5)	H(272)	-C(27)	-H(273)	115. (5)
C(3)	-C(8)	-H(81)	108. (4)	C(23)	-C(28)	-H(281)	115. (4)
C(3)	-C(8)	-H(82)	108. (3)	C(23)	-C(28)	-H(282)	111. (3)
C(3)	-C(8)	-H(83)	118. (4)	C(23)	-C(28)	-H(283)	116. (4)
H(81)	-C(8)	-H(82)	108. (5)	H(281)	-C(28)	-H(282)	108. (5)
H(81)	-C(8)	-H(83)	117. (6)	H(281)	-C(28)	-H(283)	103. (5)
H(82)	-C(8)	-H(83)	97. (5)	H(282)	-C(28)	-H(283)	103. (5)
C(4)	-C(9)	-H(91)	115. (4)	C(24)	-C(29)	-H(291)	113. (3)
C(4)	-C(9)	-H(92)	106. (3)	C(24)	-C(29)	-H(292)	115. (4)
C(4)	-C(9)	-H(93)	109. (4)	C(24)	-C(29)	-H(293)	103. (3)
H(91)	-C(9)	-H(92)	115. (5)	H(291)	-C(29)	-H(292)	115. (5)
H(91)	-C(9)	-H(93)	109. (5)	H(291)	-C(29)	-H(293)	105. (5)
H(92)	-C(9)	-H(93)	103. (5)	H(292)	-C(29)	-H(293)	103. (5)
C(5)	-C(10)	-H(101)	111. (4)	C(25)	-C(30)	-H(301)	111. (4)
C(5)	-C(10)	-H(102)	115. (3)	C(25)	-C(30)	-H(302)	112. (3)
C(5)	-C(10)	-H(103)	114. (4)	C(25)	-C(30)	-H(303)	120. (3)
H(101)	-C(10)	-H(102)	101. (5)	H(301)	-C(30)	-H(302)	113. (5)
H(101)	-C(10)	-H(103)	127. (6)	H(301)	-C(30)	-H(303)	101. (5)
H(102)	-C(10)	-H(103)	86. (5)	H(302)	-C(30)	-H(303)	100. (5)
C(11)	-C(16)	-H(161)	112. (3)	C(31)	-C(36)	-H(361)	114. (4)
C(11)	-C(16)	-H(162)	108. (4)	C(31)	-C(36)	-H(362)	110. (3)
C(11)	-C(16)	-H(163)	108. (3)	C(31)	-C(36)	-H(363)	110. (4)
H(161)	-C(16)	-H(162)	110. (5)	H(361)	-C(36)	-H(362)	99. (5)
H(161)	-C(16)	-H(163)	103. (5)	H(361)	-C(36)	-H(363)	106. (5)
H(162)	-C(16)	-H(163)	115. (5)	H(362)	-C(36)	-H(363)	118. (5)
C(12)	-C(17)	-H(171)	117. (3)	C(32)	-C(37)	-H(371)	115. (4)
C(12)	-C(17)	-H(172)	118. (3)	C(32)	-C(37)	-H(372)	116. (3)
C(12)	-C(17)	-H(173)	115. (3)	C(32)	-C(37)	-H(373)	117. (4)
H(171)	-C(17)	-H(172)	101. (5)	H(371)	-C(37)	-H(372)	82. (5)
H(171)	-C(17)	-H(173)	102. (5)	H(371)	-C(37)	-H(373)	113. (6)
H(172)	-C(17)	-H(173)	101. (5)	H(372)	-C(37)	-H(373)	109. (5)
C(13)	-C(18)	-H(181)	118. (4)	C(33)	-C(38)	-H(381)	107. (4)
C(13)	-C(18)	-H(182)	119. (4)	C(33)	-C(38)	-H(382)	116. (3)
C(13)	-C(18)	-H(183)	107. (3)	C(33)	-C(38)	-H(383)	112. (4)
H(181)	-C(18)	-H(182)	101. (5)	H(381)	-C(38)	-H(382)	104. (5)
H(181)	-C(18)	-H(183)	113. (5)	H(381)	-C(38)	-H(383)	112. (5)
H(182)	-C(18)	-H(183)	98. (5)	H(382)	-C(38)	-H(383)	105. (5)
C(14)	-C(19)	-H(191)	111. (3)	C(34)	-C(39)	-H(391)	110. (3)
C(14)	-C(19)	-H(192)	107. (3)	C(34)	-C(39)	-H(392)	120. (3)
C(14)	-C(19)	-H(193)	108. (4)	C(34)	-C(39)	-H(393)	109. (4)
H(191)	-C(19)	-H(192)	100. (5)	H(391)	-C(39)	-H(392)	112. (5)
H(191)	-C(19)	-H(193)	113. (5)	H(391)	-C(39)	-H(393)	100. (5)
H(192)	-C(19)	-H(193)	118. (5)	H(392)	-C(39)	-H(393)	104. (5)
C(15)	-C(20)	-H(201)	108. (4)	C(35)	-C(40)	-H(401)	114. (3)
C(15)	-C(20)	-H(202)	107. (4)	C(35)	-C(40)	-H(402)	118. (3)
C(15)	-C(20)	-H(203)	118. (4)	C(35)	-C(40)	-H(403)	118. (4)
H(201)	-C(20)	-H(202)	112. (5)	H(401)	-C(40)	-H(402)	109. (5)
H(201)	-C(20)	-H(203)	89. (5)	H(401)	-C(40)	-H(403)	84. (5)
H(202)	-C(20)	-H(203)	121. (5)	H(402)	-C(40)	-H(403)	109. (5)

-15-

L 2317-m31

O(1)	-C(41)	-H(411)	111.(3)	O(2)	-C(45)	-H(451)	106.(3)
O(1)	-C(41)	-H(412)	104.(3)	O(2)	-C(45)	-H(452)	107.(4)
C(42)	-C(41)	-H(411)	109.(3)	C(46)	-C(45)	-H(451)	108.(3)
C(42)	-C(41)	-H(412)	114.(4)	C(46)	-C(45)	-H(452)	111.(4)
H(411)	-C(41)	-H(412)	114.(5)	H(451)	-C(45)	-H(452)	120.(5)
C(41)	-C(42)	-H(421)	113.(4)	C(45)	-C(46)	-H(461)	115.(4)
C(41)	-C(42)	-H(422)	110.(4)	C(45)	-C(46)	-H(462)	110.(4)
C(43)	-C(42)	-H(421)	117.(4)	C(47)	-C(46)	-H(461)	107.(4)
C(43)	-C(42)	-H(422)	114.(4)	C(47)	-C(46)	-H(462)	111.(4)
H(421)	-C(42)	-H(422)	101.(5)	H(461)	-C(46)	-H(462)	111.(5)
C(42)	-C(43)	-H(431)	120.(4)	C(46)	-C(47)	-H(471)	112.(3)
C(42)	-C(43)	-H(432)	107.(4)	C(46)	-C(47)	-H(472)	110.(5)
C(44)	-C(43)	-H(431)	108.(4)	C(48)	-C(47)	-H(471)	117.(3)
C(44)	-C(43)	-H(432)	111.(4)	C(48)	-C(47)	-H(472)	116.(5)
H(431)	-C(43)	-H(432)	105.(5)	H(471)	-C(47)	-H(472)	97.(6)
O(1)	-C(44)	-H(441)	105.(3)	O(2)	-C(48)	-H(481)	105.(3)
O(1)	-C(44)	-H(442)	115.(3)	O(2)	-C(48)	-H(482)	103.(3)
C(43)	-C(44)	-H(441)	113.(3)	C(47)	-C(48)	-H(481)	113.(3)
C(43)	-C(44)	-H(442)	107.(3)	C(47)	-C(48)	-H(482)	119.(4)
H(441)	-C(44)	-H(442)	111.(4)	H(481)	-C(48)	-H(482)	108.(5)

L 2317. m32

TABLE V. TORSION ANGLES (DEG.) FOR: CP055 P-1 M.BOOY.

O(3)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	15.2(5)	C(2)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	1.4(7)
O(3)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	-165.2(5)	C(2)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	174.0(6)
C(1)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	-73.6(5)	C(6)	-C(1)	-C(5)	-Ce(1)	112.4(7)
C(1)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	106.1(5)	C(6)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	-175.3(6)
C(2)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	-77.7(5)	C(6)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	-3. (1)
C(2)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	102.0(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-O(1)	172.2(4)
C(3)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	-105.6(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-O(3)	68.6(4)
C(3)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	74.1(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-C(3)	-113.8(6)
C(4)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	-121.2(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-C(4)	-77.1(4)
C(4)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	58.5(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-C(5)	-37.7(4)
C(5)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	-103.9(5)	C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-C(11)	-115.3(4)
C(5)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	75.8(6)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-O(1)	-74.0(4)
C(11)	-Ce(1)	-O(1)	-C(41)	146.9(5)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-O(3)	-177.6(4)
C(11)	-Ce(1)	-O(1)	-C(44)	-33.5(5)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-C(1)	113.8(6)
O(3)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	13.6(5)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-C(4)	36.7(4)
O(3)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-167.9(5)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-C(5)	76.1(4)
C(21)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	118.8(5)	C(3)	-C(2)	-Ce(1)	-C(11)	-1.5(5)
C(21)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-62.7(5)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-O(1)	48.4(5)
C(22)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	104.5(5)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-O(3)	-55.1(5)
C(22)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-77.0(5)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-C(1)	-123.8(7)
C(23)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	124.8(5)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-C(3)	122.4(7)
C(23)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-56.7(6)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-C(4)	159.2(6)
C(24)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	153.3(5)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-C(5)	-161.5(6)
C(24)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-28.2(6)	C(7)	-C(2)	-Ce(1)	-C(11)	120.9(5)
C(25)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	147.7(5)	Ce(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	-69.3(5)
C(25)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	-33.9(5)	Ce(1)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	121.9(7)
C(31)	-Ce(2)	-O(2)	-C(45)	-76.0(5)	C(1)	-C(2)	-C(3)	-Ce(1)	68.5(5)
C(31)	-Ce(2)	-O(2)	-C(48)	102.5(5)	C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	-8.7(7)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-O(1)	-8.4(4)	C(1)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	-169.7(6)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-O(3)	-110.9(4)	C(7)	-C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-112.7(6)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-C(3)	36.0(4)	C(7)	-C(2)	-C(3)	-C(4)	178.0(6)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-C(4)	74.8(4)	C(7)	-C(2)	-C(3)	-C(8)	9. (1)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-C(5)	112.1(6)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-O(1)	100.8(4)
C(2)	-C(1)	-Ce(1)	-C(11)	95.2(5)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-O(3)	2.9(5)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-O(1)	-120.5(4)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-C(1)	-37.2(4)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-O(3)	137.0(4)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-C(4)	-113.3(6)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-C(2)	-112.1(6)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-C(5)	-77.3(4)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-C(3)	-76.1(4)	C(2)	-C(3)	-Ce(1)	-C(11)	178.8(4)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-C(4)	-37.3(4)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-O(1)	-145.9(4)
C(5)	-C(1)	-Ce(1)	-C(11)	-16.9(6)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-O(3)	116.2(4)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-O(1)	114.5(5)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-C(1)	76.1(4)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-O(3)	11.9(5)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-C(2)	113.3(6)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-C(2)	122.9(7)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-C(5)	36.1(4)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-C(3)	158.9(6)	C(4)	-C(3)	-Ce(1)	-C(11)	-67.8(4)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-C(4)	-162.3(6)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-O(1)	-22.8(5)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-C(5)	-125.0(7)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-O(3)	-120.7(5)
C(6)	-C(1)	-Ce(1)	-C(11)	-142.0(5)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-C(1)	-160.8(7)
Ce(1)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-71.0(5)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-C(2)	-123.6(8)
Ce(1)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	110.2(6)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-C(4)	123.1(7)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-Ce(1)	70.6(4)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-C(5)	159.1(7)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	-4.7(7)	C(8)	-C(3)	-Ce(1)	-C(11)	55.2(6)
C(5)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	-179.1(6)	Ce(1)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	-66.1(5)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-Ce(1)	-112.7(6)	Ce(1)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	125.1(6)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-C(3)	176.3(6)	C(2)	-C(3)	-C(4)	-Ce(1)	67.7(5)
C(6)	-C(1)	-C(2)	-C(7)	-2. (1)	C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	1.6(7)
Ce(1)	-C(1)	-C(5)	-C(4)	72.4(4)	C(2)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	-167.2(6)
Ce(1)	-C(1)	-C(5)	-C(10)	-115.0(7)	C(8)	-C(3)	-C(4)	-Ce(1)	-123.2(6)
C(2)	-C(1)	-C(5)	-Ce(1)	-71.0(4)	C(8)	-C(3)	-C(4)	-C(5)	170.8(6)

L2317-m33

C(8)	-C(3)	-C(4)	-C(9)	2. (1)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-O(1)	42.9(5)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-O(1)	33.6(4)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-O(3)	144.8(5)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-O(3)	-84.5(4)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-C(1)	-71.4(6)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-C(1)	-77.0(4)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-C(2)	-29.8(6)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-C(2)	-36.7(4)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-C(3)	-30.6(6)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-C(5)	-115.2(6)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-C(4)	-56.6(5)
C(3)	-C(4)	-Oe(1)	-C(11)	116.4(4)	C(16)	-C(11)	-Oe(1)	-C(5)	-80.1(6)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-O(1)	148.7(4)	Oe(1)	-C(11)	-C(12)	-C(13)	66.2(5)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-O(3)	30.7(5)	Oe(1)	-C(11)	-C(12)	-C(17)	-127.8(7)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-C(1)	38.2(4)	C(15)	-C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-67.4(5)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-C(2)	78.4(4)	C(15)	-C(11)	-C(12)	-C(13)	-1.2(8)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-C(3)	115.2(6)	C(15)	-C(11)	-C(12)	-C(17)	164.7(6)
C(5)	-C(4)	-Oe(1)	-C(11)	-128.5(4)	C(16)	-C(11)	-C(12)	-Oe(1)	122.9(7)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-O(1)	-89.1(6)	C(16)	-C(11)	-C(12)	-C(13)	-170.9(6)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-O(3)	152.8(5)	C(16)	-C(11)	-C(12)	-C(17)	-5. (1)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-C(1)	160.3(7)	Oe(1)	-C(11)	-C(15)	-C(14)	-68.5(4)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-C(2)	-159.4(7)	Oe(1)	-C(11)	-C(15)	-C(20)	116.7(7)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-C(3)	-122.7(8)	C(12)	-C(11)	-C(15)	-Oe(1)	68.7(5)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-C(5)	122.1(8)	C(12)	-C(11)	-C(15)	-C(14)	.2(7)
C(9)	-C(4)	-Oe(1)	-C(11)	-6.3(6)	C(12)	-C(11)	-C(15)	-C(20)	-174.6(6)
Oe(1)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	-69.7(4)	C(16)	-C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-121.9(7)
Oe(1)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	117.7(7)	C(16)	-C(11)	-C(15)	-C(14)	169.6(6)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-Oe(1)	67.8(5)	C(16)	-C(11)	-C(15)	-C(20)	-5. (1)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	-1.9(7)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-O(1)	-15.4(5)
C(3)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	-174.5(6)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-O(3)	111.1(4)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-123.5(7)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-C(1)	-144.4(4)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-C(1)	166.8(6)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-C(2)	-111.9(4)
C(9)	-C(4)	-C(5)	-C(10)	-6. (1)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-C(3)	-95.5(4)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-O(1)	73.9(4)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-C(4)	-113.0(4)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-O(3)	-44.6(4)	C(11)	-C(12)	-Oe(1)	-C(5)	-140.8(4)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-C(2)	37.5(4)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-O(1)	-129.7(3)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-C(3)	76.1(4)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-O(3)	-3.3(4)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-C(4)	111.7(6)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(1)	101.2(4)
C(1)	-C(5)	-Oe(1)	-C(11)	168.1(4)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(2)	133.8(4)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-O(1)	-37.8(5)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(3)	150.1(4)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-O(3)	-156.3(4)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(4)	132.7(4)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-C(1)	-111.7(6)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(5)	104.9(4)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-C(2)	-74.2(4)	C(13)	-C(12)	-Oe(1)	-C(11)	-114.3(6)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-C(3)	-35.6(4)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-O(1)	108.3(6)
C(4)	-C(5)	-Oe(1)	-C(11)	56.4(4)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-O(3)	-125.2(6)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-O(1)	-163.3(4)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(1)	-20.7(7)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-O(3)	78.2(5)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(2)	11.9(7)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-C(1)	122.8(7)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(3)	28.2(6)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-C(2)	160.3(6)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(4)	10.7(6)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-C(3)	-161.1(6)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(5)	-17.1(6)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-C(4)	-125.5(7)	C(17)	-C(12)	-Oe(1)	-C(11)	123.7(8)
C(10)	-C(5)	-Oe(1)	-C(11)	-69.1(5)	Oe(1)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	70.3(5)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-O(1)	165.4(4)	Oe(1)	-C(12)	-C(13)	-C(18)	-119.8(6)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-O(3)	-92.7(4)	C(11)	-C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-68.5(5)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-C(1)	51.1(6)	C(11)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	1.8(8)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-C(2)	92.6(5)	C(11)	-C(12)	-C(13)	-C(18)	171.7(6)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-C(3)	91.9(4)	C(17)	-C(12)	-C(13)	-Oe(1)	125.7(6)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-C(4)	65.9(4)	C(17)	-C(12)	-C(13)	-C(14)	-164.0(6)
C(12)	-C(11)	-Oe(1)	-C(5)	42.3(5)	C(17)	-C(12)	-C(13)	-C(18)	6. (1)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-O(1)	-80.4(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-O(1)	62.9(4)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-O(3)	21.5(5)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-O(3)	177.4(4)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-C(1)	165.3(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(1)	-94.6(4)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-C(2)	-153.1(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(2)	-72.1(5)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-C(3)	-153.9(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(3)	-37.7(4)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-C(4)	-179.9(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(4)	-47.9(4)
C(15)	-C(11)	-Oe(1)	-C(5)	156.6(4)	C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(5)	-76.3(4)

L2317-m34

C(12)	-C(13)	-Oe(1)	-C(11)	36.0(4)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-O(3)	-51.3(4)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-O(1)	-49.7(5)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-C(2)	165.8(5)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-O(3)	64.8(4)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-C(3)	146.0(4)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(1)	152.8(4)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-C(4)	112.5(4)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(2)	175.3(4)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-C(5)	80.1(5)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(3)	-150.3(4)	C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-C(11)	112.4(6)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(4)	-160.4(4)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-O(1)	-29.6(5)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(5)	171.1(4)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-O(3)	72.0(5)
C(14)	-C(13)	-Oe(1)	-C(11)	-76.6(4)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-C(2)	-71.0(7)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-O(1)	-173.2(5)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-C(3)	-90.7(6)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-O(3)	-58.7(5)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-C(4)	-124.2(5)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(1)	29.3(6)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-C(5)	-156.6(5)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(2)	51.8(7)	C(20)	-C(15)	-Oe(1)	-C(11)	-124.4(7)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(3)	86.2(6)	C(22)	-C(21)	-Oe(2)	-O(3)	-50.4(4)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(4)	76.1(5)	C(22)	-C(21)	-Oe(2)	-O(2)	-150.1(4)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(5)	47.6(5)	C(22)	-C(21)	-Oe(2)	-C(23)	36.7(4)
C(18)	-C(13)	-Oe(1)	-C(11)	159.9(6)	C(22)	-C(21)	-Oe(2)	-C(24)	75.7(4)
Oe(1)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	71.1(5)	C(22)	-C(21)	-Oe(2)	-C(25)	112.2(6)
Oe(1)	-C(13)	-C(14)	-C(19)	-113.2(6)	C(25)	-C(21)	-Oe(2)	-O(3)	-162.5(4)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-72.7(5)	C(25)	-C(21)	-Oe(2)	-O(2)	97.8(4)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	-1.6(8)	C(25)	-C(21)	-Oe(2)	-C(22)	-112.2(6)
C(12)	-C(13)	-C(14)	-C(19)	174.1(6)	C(25)	-C(21)	-Oe(2)	-C(23)	-75.5(4)
C(18)	-C(13)	-C(14)	-Oe(1)	117.5(7)	C(25)	-C(21)	-Oe(2)	-C(24)	-36.5(4)
C(18)	-C(13)	-C(14)	-C(15)	-171.4(6)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-O(3)	73.2(5)
C(18)	-C(13)	-C(14)	-C(19)	4. (1)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-O(2)	-26.5(5)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-O(1)	140.1(4)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-C(22)	123.5(7)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-O(3)	-116.5(4)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-C(23)	160.2(6)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-C(1)	-42.2(6)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-C(24)	-160.8(6)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-C(3)	52.3(6)	C(26)	-C(21)	-Oe(2)	-C(25)	-124.3(7)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-C(4)	24.7(5)	Oe(2)	-C(21)	-C(22)	-C(23)	-70.2(5)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-C(5)	-10.7(5)	Oe(2)	-C(21)	-C(22)	-C(27)	116.3(7)
C(13)	-C(14)	-Oe(1)	-C(11)	75.5(4)	C(25)	-C(21)	-C(22)	-Oe(2)	70.4(5)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-O(1)	27.6(4)	C(25)	-C(21)	-C(22)	-C(23)	.2(8)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-O(3)	131.0(4)	C(25)	-C(21)	-C(22)	-C(27)	-173.3(7)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-C(1)	-154.7(4)	C(26)	-C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-114.6(7)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-C(3)	-60.2(6)	C(26)	-C(21)	-C(22)	-C(23)	175.2(7)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-C(4)	-87.8(4)	C(26)	-C(21)	-C(22)	-C(27)	2. (1)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-C(5)	-123.2(4)	Oe(2)	-C(21)	-C(25)	-C(24)	69.8(5)
C(15)	-C(14)	-Oe(1)	-C(11)	-37.0(4)	Oe(2)	-C(21)	-C(25)	-C(30)	-115.7(7)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-O(1)	-98.0(5)	C(22)	-C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-69.9(5)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-O(3)	5.5(5)	C(22)	-C(21)	-C(25)	-C(24)	.0(8)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-C(1)	79.8(6)	C(22)	-C(21)	-C(25)	-C(30)	174.5(7)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-C(3)	174.3(4)	C(26)	-C(21)	-C(25)	-Oe(2)	115.2(7)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-C(4)	146.6(5)	C(26)	-C(21)	-C(25)	-C(24)	-175.0(7)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-C(5)	111.2(5)	C(26)	-C(21)	-C(25)	-C(30)	0. (1)
C(19)	-C(14)	-Oe(1)	-C(11)	-162.6(6)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-O(3)	132.7(4)
Oe(1)	-C(14)	-C(15)	-C(11)	71.0(5)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-O(2)	29.8(4)
Oe(1)	-C(14)	-C(15)	-C(20)	-114.2(7)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-C(23)	-113.3(6)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-70.1(5)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-C(24)	-77.0(4)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-C(11)	.9(7)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-C(25)	-37.4(4)
C(13)	-C(14)	-C(15)	-C(20)	175.7(6)	C(21)	-C(22)	-Oe(2)	-C(31)	-149.4(4)
C(19)	-C(14)	-C(15)	-Oe(1)	114.3(7)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-O(3)	-114.0(4)
C(19)	-C(14)	-C(15)	-C(11)	-174.7(6)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-O(2)	143.1(4)
C(19)	-C(14)	-C(15)	-C(20)	0. (1)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-C(21)	113.3(6)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-O(1)	94.8(4)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-C(24)	36.3(4)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-O(3)	-163.7(4)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-C(25)	75.9(4)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-C(2)	53.4(7)	C(23)	-C(22)	-Oe(2)	-C(31)	-36.1(6)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-C(3)	33.7(5)	C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-O(3)	9.3(5)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-C(4)	.1(5)	C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-O(2)	-93.6(5)
C(11)	-C(15)	-Oe(1)	-C(5)	-32.2(5)	C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-C(21)	-123.4(7)
C(14)	-C(15)	-Oe(1)	-O(1)	-152.8(4)	C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-C(23)	123.3(7)

L2317-m35

C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-C(24)	159.6(6)	C(23)	-C(24)	-C(25)	-C(30)	-174.9(6)
C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-C(25)	-160.8(6)	C(29)	-C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-126.7(7)
C(27)	-C(22)	-Oe(2)	-C(31)	87.2(6)	C(29)	-C(24)	-C(25)	-C(21)	164.7(7)
Oe(2)	-C(22)	-C(23)	-C(24)	-69.7(5)	C(29)	-C(24)	-C(25)	-C(30)	-10.1(1)
Oe(2)	-C(22)	-C(23)	-C(28)	120.5(7)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-O(3)	23.7(5)
C(21)	-C(22)	-C(23)	-Oe(2)	69.4(5)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-O(2)	-76.9(4)
C(21)	-C(22)	-C(23)	-C(24)	-3.3(8)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-C(22)	37.7(4)
C(21)	-C(22)	-C(23)	-C(28)	-170.0(7)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-C(23)	77.1(4)
C(27)	-C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-117.0(7)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-C(24)	114.1(6)
C(27)	-C(22)	-C(23)	-C(24)	173.3(7)	C(21)	-C(25)	-Oe(2)	-C(31)	171.1(4)
C(27)	-C(22)	-C(23)	-C(28)	4.1(1)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-O(3)	-90.4(4)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-O(3)	67.9(4)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-O(2)	169.0(4)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-O(2)	-45.1(5)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-C(21)	-114.1(6)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-C(21)	-37.1(4)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-C(22)	-76.5(4)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-C(24)	-114.2(5)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-C(23)	-37.0(4)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-C(25)	-76.7(4)	C(24)	-C(25)	-Oe(2)	-C(31)	57.0(5)
C(22)	-C(23)	-Oe(2)	-C(31)	157.9(4)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-O(3)	148.4(5)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-O(3)	-178.0(3)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-O(2)	47.8(5)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-O(2)	69.1(4)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-C(21)	124.7(7)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-C(21)	77.0(4)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-C(22)	162.3(6)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-C(22)	114.2(5)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-C(23)	-158.2(6)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-C(25)	37.4(3)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-C(24)	-121.2(7)
C(24)	-C(23)	-Oe(2)	-C(31)	-88.0(4)	C(30)	-C(25)	-Oe(2)	-C(31)	-64.2(6)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-O(3)	-56.1(6)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-O(3)	139.1(4)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-O(2)	-169.1(5)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-O(2)	-118.8(4)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-C(21)	-161.1(7)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-C(22)	60.3(6)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-C(22)	-124.0(8)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-C(23)	40.9(5)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-C(24)	121.8(7)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-C(24)	8.7(4)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-C(25)	159.3(7)	C(32)	-C(31)	-Oe(2)	-C(25)	-18.2(5)
C(28)	-C(23)	-Oe(2)	-C(31)	33.9(6)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-O(3)	-109.3(4)
Oe(2)	-C(23)	-C(24)	-C(25)	-68.2(5)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-O(2)	-7.2(5)
Oe(2)	-C(23)	-C(24)	-C(29)	126.3(7)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-C(22)	172.0(4)
C(22)	-C(23)	-C(24)	-Oe(2)	68.5(5)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-C(23)	152.6(4)
C(22)	-C(23)	-C(24)	-C(25)	.3(8)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-C(24)	120.3(4)
C(22)	-C(23)	-C(24)	-C(29)	-165.2(7)	C(35)	-C(31)	-Oe(2)	-C(25)	93.4(5)
C(28)	-C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-121.4(6)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-O(3)	12.9(5)
C(28)	-C(23)	-C(24)	-C(25)	170.4(6)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-O(2)	114.9(5)
C(28)	-C(23)	-C(24)	-C(29)	5.1(1)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-C(22)	-65.9(7)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-O(3)	2.5(4)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-C(23)	-85.3(5)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-O(2)	-124.3(3)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-C(24)	-117.6(5)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-C(21)	-76.1(4)	C(36)	-C(31)	-Oe(2)	-C(25)	-144.4(5)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-C(22)	-36.5(3)	Oe(2)	-C(31)	-C(32)	-C(33)	71.3(5)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-C(25)	-112.6(5)	Oe(2)	-C(31)	-C(32)	-C(37)	-112.8(6)
C(23)	-C(24)	-Oe(2)	-C(31)	108.0(4)	C(35)	-C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-71.8(4)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-O(3)	115.1(4)	C(35)	-C(31)	-C(32)	-C(33)	-5.7(1)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-O(2)	-11.7(4)	C(35)	-C(31)	-C(32)	-C(37)	175.3(6)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-C(21)	36.5(4)	C(36)	-C(31)	-C(32)	-Oe(2)	112.3(7)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-C(22)	76.1(4)	C(36)	-C(31)	-C(32)	-C(33)	-176.4(6)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-C(23)	112.6(5)	C(36)	-C(31)	-C(32)	-C(37)	-1.1(1)
C(25)	-C(24)	-Oe(2)	-C(31)	-139.3(4)	Oe(2)	-C(31)	-C(35)	-C(34)	-72.1(5)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-O(3)	-119.1(6)	Oe(2)	-C(31)	-C(35)	-C(40)	112.0(7)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-O(2)	114.1(5)	C(32)	-C(31)	-C(35)	-Oe(2)	72.2(5)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-C(21)	162.3(7)	C(32)	-C(31)	-C(35)	-C(34)	.0(7)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-C(22)	-158.1(7)	C(32)	-C(31)	-C(35)	-C(40)	-175.8(6)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-C(23)	-121.6(7)	C(36)	-C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-111.7(6)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-C(25)	125.8(8)	C(36)	-C(31)	-C(35)	-C(34)	176.1(6)
C(29)	-C(24)	-Oe(2)	-C(31)	-13.6(6)	C(36)	-C(31)	-C(35)	-C(40)	0.1(1)
Oe(2)	-C(24)	-C(25)	-C(21)	-68.6(5)	C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-O(3)	-43.0(4)
Oe(2)	-C(24)	-C(25)	-C(30)	116.6(7)	C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-O(2)	74.9(4)
C(23)	-C(24)	-C(25)	-Oe(2)	68.4(5)	C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-C(21)	179.0(4)
C(23)	-C(24)	-C(25)	-C(21)	-1.1(8)	C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-C(22)	-143.7(4)

-20-

L 2317-m 36

C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-C(23)	-145.7(4)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-O(3)	70.7(4)
C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-C(24)	-172.2(4)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-O(2)	173.2(4)
C(31)	-C(32)	-Oe(2)	-C(25)	166.8(4)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-C(21)	-146.1(5)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-O(3)	-155.7(4)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-C(23)	-44.2(6)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-O(2)	-37.8(5)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-C(24)	-77.2(5)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(21)	66.2(5)	C(31)	-C(35)	-Oe(2)	-C(25)	-114.4(4)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(22)	103.5(4)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-O(3)	-176.9(4)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(23)	101.6(4)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-O(2)	-74.4(4)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(24)	75.0(4)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-C(21)	-33.7(6)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(25)	54.1(5)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-C(23)	68.2(5)
C(33)	-C(32)	-Oe(2)	-C(31)	-112.8(6)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-C(24)	35.2(5)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-O(3)	78.2(5)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-C(25)	-2.0(5)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-O(2)	-163.9(5)	C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-C(31)	112.4(6)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(21)	-59.9(6)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-O(3)	-53.9(5)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(22)	-22.6(6)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-O(2)	48.5(5)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(23)	-24.5(6)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-C(21)	89.2(6)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(24)	-51.1(5)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-C(23)	-168.9(4)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(25)	-72.1(6)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-C(24)	158.2(4)
C(37)	-C(32)	-Oe(2)	-C(31)	121.1(7)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-C(25)	121.0(5)
Oe(2)	-C(32)	-C(33)	-C(34)	68.8(5)	C(40)	-C(35)	-Oe(2)	-C(31)	-124.7(7)
Oe(2)	-C(32)	-C(33)	-C(38)	-124.7(7)	C(42)	-C(41)	-O(1)	-Oe(1)	138.8(4)
C(31)	-C(32)	-C(33)	-C(34)	.8(8)	C(42)	-C(41)	-O(1)	-C(44)	-41.0(7)
C(31)	-C(32)	-C(33)	-C(38)	167.3(6)	O(1)	-C(41)	-C(42)	-C(43)	37.3(7)
C(37)	-C(32)	-C(33)	-C(34)	-174.9(6)	C(41)	-C(42)	-C(43)	-C(44)	-20.2(7)
C(37)	-C(32)	-C(33)	-C(38)	-8. (1)	C(42)	-C(43)	-C(44)	-O(1)	-3.8(8)
C(32)	-C(33)	-C(34)	-C(35)	-.8(8)	C(43)	-C(44)	-O(1)	-Oe(1)	-152.1(4)
C(32)	-C(33)	-C(34)	-C(39)	169.5(6)	C(43)	-C(44)	-O(1)	-C(41)	27.6(7)
C(38)	-C(33)	-C(34)	-C(35)	-167.6(6)	C(46)	-C(45)	-O(2)	-Oe(2)	141.5(4)
C(38)	-C(33)	-C(34)	-C(39)	3. (1)	C(46)	-C(45)	-O(2)	-C(48)	-37.4(7)
C(33)	-C(34)	-C(35)	-Oe(2)	-68.2(5)	O(2)	-C(45)	-C(46)	-C(47)	37.5(7)
C(33)	-C(34)	-C(35)	-C(31)	.5(7)	C(45)	-C(46)	-C(47)	-C(48)	-23.5(8)
C(33)	-C(34)	-C(35)	-C(40)	176.5(6)	C(46)	-C(47)	-C(48)	-O(2)	1.4(8)
C(39)	-C(34)	-C(35)	-Oe(2)	121.2(6)	C(47)	-C(48)	-O(2)	-Oe(2)	-156.5(4)
C(39)	-C(34)	-C(35)	-C(31)	-170.1(6)	C(47)	-C(48)	-O(2)	-C(45)	22.2(7)
C(39)	-C(34)	-C(35)	-C(40)	6. (1)					

L2317-m37

-HYDROGEN- PARAMETERS:

Oe(1)	-C(1)	-C(6)	-H(61)	-3. (4)	C(13)	-C(12)	-C(17)	-H(171)	-164. (4)
Oe(1)	-C(1)	-C(6)	-H(62)	119. (4)	C(13)	-C(12)	-C(17)	-H(172)	-43. (4)
Oe(1)	-C(1)	-C(6)	-H(63)	-130. (4)	C(13)	-C(12)	-C(17)	-H(173)	77. (4)
C(2)	-C(1)	-C(6)	-H(61)	89. (4)	Oe(1)	-C(13)	-C(18)	-H(181)	-107. (4)
C(2)	-C(1)	-C(6)	-H(62)	-149. (4)	Oe(1)	-C(13)	-C(18)	-H(182)	16. (5)
C(2)	-C(1)	-C(6)	-H(63)	-38. (4)	Oe(1)	-C(13)	-C(18)	-H(183)	125. (3)
C(5)	-C(1)	-C(6)	-H(61)	-95. (4)	C(12)	-C(13)	-C(18)	-H(181)	-9. (4)
C(5)	-C(1)	-C(6)	-H(62)	27. (4)	C(12)	-C(13)	-C(18)	-H(182)	114. (5)
C(5)	-C(1)	-C(6)	-H(63)	138. (4)	C(12)	-C(13)	-C(18)	-H(183)	-137. (3)
Oe(1)	-C(2)	-C(7)	-H(71)	110. (5)	C(14)	-C(13)	-C(18)	-H(181)	159. (4)
Oe(1)	-C(2)	-C(7)	-H(72)	5. (4)	C(14)	-C(13)	-C(18)	-H(182)	-78. (5)
Oe(1)	-C(2)	-C(7)	-H(73)	-100. (4)	C(14)	-C(13)	-C(18)	-H(183)	31. (4)
C(1)	-C(2)	-C(7)	-H(71)	22. (5)	Oe(1)	-C(14)	-C(19)	-H(191)	-21. (4)
C(1)	-C(2)	-C(7)	-H(72)	-84. (4)	Oe(1)	-C(14)	-C(19)	-H(192)	-129. (4)
C(1)	-C(2)	-C(7)	-H(73)	172. (4)	Oe(1)	-C(14)	-C(19)	-H(193)	104. (4)
C(3)	-C(2)	-C(7)	-H(71)	-157. (5)	C(13)	-C(14)	-C(19)	-H(191)	70. (4)
C(3)	-C(2)	-C(7)	-H(72)	98. (4)	C(13)	-C(14)	-C(19)	-H(192)	-38. (4)
C(3)	-C(2)	-C(7)	-H(73)	-7. (4)	C(13)	-C(14)	-C(19)	-H(193)	-165. (4)
Oe(1)	-C(3)	-C(8)	-H(81)	-72. (4)	C(15)	-C(14)	-C(19)	-H(191)	-115. (4)
Oe(1)	-C(3)	-C(8)	-H(82)	171. (3)	C(15)	-C(14)	-C(19)	-H(192)	137. (4)
Oe(1)	-C(3)	-C(8)	-H(83)	63. (5)	C(15)	-C(14)	-C(19)	-H(193)	10. (4)
C(2)	-C(3)	-C(8)	-H(81)	-167. (4)	Oe(1)	-C(15)	-C(20)	-H(201)	122. (4)
C(2)	-C(3)	-C(8)	-H(82)	76. (3)	Oe(1)	-C(15)	-C(20)	-H(202)	-117. (4)
C(2)	-C(3)	-C(8)	-H(83)	-32. (5)	Oe(1)	-C(15)	-C(20)	-H(203)	24. (5)
C(4)	-C(3)	-C(8)	-H(81)	25. (4)	C(11)	-C(15)	-C(20)	-H(201)	27. (4)
C(4)	-C(3)	-C(8)	-H(82)	-92. (3)	C(11)	-C(15)	-C(20)	-H(202)	148. (4)
C(4)	-C(3)	-C(8)	-H(83)	161. (5)	C(11)	-C(15)	-C(20)	-H(203)	-71. (5)
Oe(1)	-C(4)	-C(9)	-H(91)	-80. (4)	C(14)	-C(15)	-C(20)	-H(201)	-147. (4)
Oe(1)	-C(4)	-C(9)	-H(92)	48. (3)	C(14)	-C(15)	-C(20)	-H(202)	-26. (4)
Oe(1)	-C(4)	-C(9)	-H(93)	158. (4)	C(14)	-C(15)	-C(20)	-H(203)	115. (5)
C(3)	-C(4)	-C(9)	-H(91)	-178. (4)	Oe(2)	-C(21)	-C(26)	-H(261)	124. (4)
C(3)	-C(4)	-C(9)	-H(92)	-50. (3)	Oe(2)	-C(21)	-C(26)	-H(262)	-113. (4)
C(3)	-C(4)	-C(9)	-H(93)	60. (4)	Oe(2)	-C(21)	-C(26)	-H(263)	13. (4)
C(5)	-C(4)	-C(9)	-H(91)	15. (4)	C(22)	-C(21)	-C(26)	-H(261)	-143. (4)
C(5)	-C(4)	-C(9)	-H(92)	143. (3)	C(22)	-C(21)	-C(26)	-H(262)	-21. (4)
C(5)	-C(4)	-C(9)	-H(93)	-107. (4)	C(22)	-C(21)	-C(26)	-H(263)	105. (4)
Oe(1)	-C(5)	-C(10)	-H(101)	37. (5)	C(25)	-C(21)	-C(26)	-H(261)	31. (5)
Oe(1)	-C(5)	-C(10)	-H(102)	150. (3)	C(25)	-C(21)	-C(26)	-H(262)	153. (4)
Oe(1)	-C(5)	-C(10)	-H(103)	-113. (4)	C(25)	-C(21)	-C(26)	-H(263)	-81. (4)
C(1)	-C(5)	-C(10)	-H(101)	129. (5)	Oe(2)	-C(22)	-C(27)	-H(271)	-13. (4)
C(1)	-C(5)	-C(10)	-H(102)	-118. (3)	Oe(2)	-C(22)	-C(27)	-H(272)	108. (4)
C(1)	-C(5)	-C(10)	-H(103)	-21. (4)	Oe(2)	-C(22)	-C(27)	-H(273)	-130. (3)
C(4)	-C(5)	-C(10)	-H(101)	-60. (5)	C(21)	-C(22)	-C(27)	-H(271)	-107. (4)
C(4)	-C(5)	-C(10)	-H(102)	53. (3)	C(21)	-C(22)	-C(27)	-H(272)	15. (4)
C(4)	-C(5)	-C(10)	-H(103)	150. (4)	C(21)	-C(22)	-C(27)	-H(273)	137. (3)
Oe(1)	-C(11)	-C(16)	-H(161)	-76. (4)	C(23)	-C(22)	-C(27)	-H(271)	81. (4)
Oe(1)	-C(11)	-C(16)	-H(162)	163. (4)	C(23)	-C(22)	-C(27)	-H(272)	-158. (4)
Oe(1)	-C(11)	-C(16)	-H(163)	37. (3)	C(23)	-C(22)	-C(27)	-H(273)	-36. (3)
C(12)	-C(11)	-C(16)	-H(161)	-173. (4)	Oe(2)	-C(23)	-C(28)	-H(281)	73. (4)
C(12)	-C(11)	-C(16)	-H(162)	66. (4)	Oe(2)	-C(23)	-C(28)	-H(282)	-51. (4)
C(12)	-C(11)	-C(16)	-H(163)	-60. (3)	Oe(2)	-C(23)	-C(28)	-H(283)	-168. (4)
C(15)	-C(11)	-C(16)	-H(161)	19. (4)	C(22)	-C(23)	-C(28)	-H(281)	-23. (4)
C(15)	-C(11)	-C(16)	-H(162)	-102. (4)	C(22)	-C(23)	-C(28)	-H(282)	-147. (4)
C(15)	-C(11)	-C(16)	-H(163)	133. (3)	C(22)	-C(23)	-C(28)	-H(283)	97. (4)
Oe(1)	-C(12)	-C(17)	-H(171)	-68. (4)	C(24)	-C(23)	-C(28)	-H(281)	169. (4)
Oe(1)	-C(12)	-C(17)	-H(172)	53. (4)	C(24)	-C(23)	-C(28)	-H(282)	45. (4)
Oe(1)	-C(12)	-C(17)	-H(173)	173. (4)	C(24)	-C(23)	-C(28)	-H(283)	-72. (4)
C(11)	-C(12)	-C(17)	-H(171)	33. (4)	Oe(2)	-C(24)	-C(29)	-H(291)	50. (4)
C(11)	-C(12)	-C(17)	-H(172)	154. (4)	Oe(2)	-C(24)	-C(29)	-H(292)	-85. (4)
C(11)	-C(12)	-C(17)	-H(173)	-87. (4)	Oe(2)	-C(24)	-C(29)	-H(293)	163. (3)

L2317-m38

C(23)	-C(24)	-C(29)	-H(291)	-48. (4)	O(1)	-C(41)	-C(42)	-H(422)	-84. (4)
C(23)	-C(24)	-C(29)	-H(292)	177. (4)	H(411)	-C(41)	-C(42)	-C(43)	-81. (4)
C(23)	-C(24)	-C(29)	-H(293)	66. (3)	H(411)	-C(41)	-C(42)	-H(421)	46. (5)
C(25)	-C(24)	-C(29)	-H(291)	150. (4)	H(411)	-C(41)	-C(42)	-H(422)	158. (5)
C(25)	-C(24)	-C(29)	-H(292)	15. (4)	H(412)	-C(41)	-C(42)	-C(43)	150. (4)
C(25)	-C(24)	-C(29)	-H(293)	-97. (3)	H(412)	-C(41)	-C(42)	-H(421)	-83. (5)
Ce(2)	-C(25)	-C(30)	-H(301)	128. (4)	H(412)	-C(41)	-C(42)	-H(422)	29. (5)
Ce(2)	-C(25)	-C(30)	-H(302)	-104. (4)	C(41)	-C(42)	-C(43)	-H(431)	-142. (4)
Ce(2)	-C(25)	-C(30)	-H(303)	12. (4)	C(41)	-C(42)	-C(43)	-H(432)	98. (4)
C(21)	-C(25)	-C(30)	-H(301)	-139. (4)	H(421)	-C(42)	-C(43)	-C(44)	-145. (4)
C(21)	-C(25)	-C(30)	-H(302)	-11. (4)	H(421)	-C(42)	-C(43)	-H(431)	93. (6)
C(21)	-C(25)	-C(30)	-H(303)	105. (4)	H(421)	-C(42)	-C(43)	-H(432)	-26. (6)
C(24)	-C(25)	-C(30)	-H(301)	35. (4)	H(422)	-C(42)	-C(43)	-C(44)	98. (4)
C(24)	-C(25)	-C(30)	-H(302)	162. (4)	H(422)	-C(42)	-C(43)	-H(431)	-24. (6)
C(24)	-C(25)	-C(30)	-H(303)	-81. (4)	H(422)	-C(42)	-C(43)	-H(432)	-144. (6)
Ce(2)	-C(31)	-C(36)	-H(361)	116. (4)	C(42)	-C(43)	-C(44)	-H(441)	-118. (3)
Ce(2)	-C(31)	-C(36)	-H(362)	-135. (4)	C(42)	-C(43)	-C(44)	-H(442)	120. (3)
Ce(2)	-C(31)	-C(36)	-H(363)	-4. (4)	H(431)	-C(43)	-C(44)	-O(1)	125. (4)
C(32)	-C(31)	-C(36)	-H(361)	22. (5)	H(431)	-C(43)	-C(44)	-H(441)	11. (5)
C(32)	-C(31)	-C(36)	-H(362)	132. (4)	H(431)	-C(43)	-C(44)	-H(442)	-111. (5)
C(32)	-C(31)	-C(36)	-H(363)	-97. (4)	H(432)	-C(43)	-C(44)	-O(1)	-120. (4)
C(35)	-C(31)	-C(36)	-H(361)	-153. (4)	H(432)	-C(43)	-C(44)	-H(441)	126. (5)
C(35)	-C(31)	-C(36)	-H(362)	-43. (4)	H(432)	-C(43)	-C(44)	-H(442)	4. (5)
C(35)	-C(31)	-C(36)	-H(363)	87. (4)	H(441)	-C(44)	-O(1)	-Ce(1)	-33. (3)
Ce(2)	-C(32)	-C(37)	-H(371)	-118. (5)	H(441)	-C(44)	-O(1)	-C(41)	147. (3)
Ce(2)	-C(32)	-C(37)	-H(372)	-25. (3)	H(442)	-C(44)	-O(1)	-Ce(1)	90. (4)
Ce(2)	-C(32)	-C(37)	-H(373)	107. (5)	H(442)	-C(44)	-O(1)	-C(41)	-91. (4)
C(31)	-C(32)	-C(37)	-H(371)	-29. (5)	H(451)	-C(45)	-O(2)	-Ce(2)	28. (3)
C(31)	-C(32)	-C(37)	-H(372)	64. (3)	H(451)	-C(45)	-O(2)	-C(48)	-151. (3)
C(31)	-C(32)	-C(37)	-H(373)	-164. (5)	H(452)	-C(45)	-O(2)	-Ce(2)	-101. (4)
C(33)	-C(32)	-C(37)	-H(371)	146. (5)	H(452)	-C(45)	-O(2)	-C(48)	80. (4)
C(33)	-C(32)	-C(37)	-H(372)	-121. (3)	O(2)	-C(45)	-C(46)	-H(461)	-79. (4)
C(33)	-C(32)	-C(37)	-H(373)	11. (5)	O(2)	-C(45)	-C(46)	-H(462)	156. (4)
C(32)	-C(33)	-C(38)	-H(381)	132. (4)	H(451)	-C(45)	-C(46)	-C(47)	149. (3)
C(32)	-C(33)	-C(38)	-H(382)	16. (4)	H(451)	-C(45)	-C(46)	-H(461)	33. (6)
C(32)	-C(33)	-C(38)	-H(383)	-105. (5)	H(451)	-C(45)	-C(46)	-H(462)	-92. (5)
C(34)	-C(33)	-C(38)	-H(381)	-64. (4)	H(452)	-C(45)	-C(46)	-C(47)	-77. (4)
C(34)	-C(33)	-C(38)	-H(382)	-179. (4)	H(452)	-C(45)	-C(46)	-H(461)	166. (6)
C(34)	-C(33)	-C(38)	-H(383)	60. (5)	H(452)	-C(45)	-C(46)	-H(462)	41. (6)
C(33)	-C(34)	-C(39)	-H(391)	24. (4)	C(45)	-C(46)	-C(47)	-H(471)	-152. (4)
C(33)	-C(34)	-C(39)	-H(392)	157. (4)	C(45)	-C(46)	-C(47)	-H(472)	102. (5)
C(33)	-C(34)	-C(39)	-H(393)	-84. (5)	H(461)	-C(46)	-C(47)	-C(48)	98. (4)
C(35)	-C(34)	-C(39)	-H(391)	-167. (4)	H(461)	-C(46)	-C(47)	-H(471)	-31. (5)
C(35)	-C(34)	-C(39)	-H(392)	-35. (4)	H(461)	-C(46)	-C(47)	-H(472)	-137. (6)
C(35)	-C(34)	-C(39)	-H(393)	85. (5)	H(462)	-C(46)	-C(47)	-C(48)	-141. (4)
Ce(2)	-C(35)	-C(40)	-H(401)	122. (4)	H(462)	-C(46)	-C(47)	-H(471)	91. (5)
Ce(2)	-C(35)	-C(40)	-H(402)	-109. (4)	H(462)	-C(46)	-C(47)	-H(472)	-16. (6)
Ce(2)	-C(35)	-C(40)	-H(403)	25. (5)	C(46)	-C(47)	-C(48)	-H(481)	-114. (4)
C(31)	-C(35)	-C(40)	-H(401)	32. (4)	C(46)	-C(47)	-C(48)	-H(482)	117. (4)
C(31)	-C(35)	-C(40)	-H(402)	161. (4)	H(471)	-C(47)	-C(48)	-O(2)	126. (4)
C(31)	-C(35)	-C(40)	-H(403)	-65. (5)	H(471)	-C(47)	-C(48)	-H(481)	11. (5)
C(34)	-C(35)	-C(40)	-H(401)	-144. (4)	H(471)	-C(47)	-C(48)	-H(482)	-118. (6)
C(34)	-C(35)	-C(40)	-H(402)	-14. (4)	H(472)	-C(47)	-C(48)	-O(2)	-120. (5)
C(34)	-C(35)	-C(40)	-H(403)	120. (5)	H(472)	-C(47)	-C(48)	-H(481)	124. (6)
H(411)	-C(41)	-O(1)	-Ce(1)	-104. (4)	H(472)	-C(47)	-C(48)	-H(482)	-4. (6)
H(411)	-C(41)	-O(1)	-C(44)	76. (4)	H(481)	-C(48)	-O(2)	-Ce(2)	-35. (4)
H(412)	-C(41)	-O(1)	-Ce(1)	19. (4)	H(481)	-C(48)	-O(2)	-C(45)	143. (4)
H(412)	-C(41)	-O(1)	-C(44)	-161. (4)	H(482)	-C(48)	-O(2)	-Ce(2)	78. (4)
O(1)	-C(41)	-C(42)	-H(421)	164. (4)	H(482)	-C(48)	-O(2)	-C(45)	-104. (4)

RESIDUE: 2.

TABLE III. BOND DISTANCES (ANG.) FOR: CP055 P-1 M.B00Y.

O(4)	-C(49)	1.52(2)	C(50)	-C(51)	1.48(2)
O(4)	-C(52)	1.45(2)	C(51)	-C(52)	1.30(2)
C(49)	-C(50)	1.34(2)			

-HYDROGEN- PARAMETERS:

C(49)	-H(491)	.99(2)	C(51)	-H(511)	1.00(2)
C(49)	-H(492)	1.01(2)	C(51)	-H(512)	1.00(2)
C(50)	-H(501)	1.01(2)	C(52)	-H(521)	1.01(2)
C(50)	-H(502)	1.01(2)	C(52)	-H(522)	1.00(2)

TABLE IV. ANGLES (DEG.) FOR: CP055 P-1 M.B00Y.

C(49)	-O(4)	-C(52)	102.(1)	C(50)	-C(51)	-C(52)	117.(1)
O(4)	-C(49)	-C(50)	112.(1)	O(4)	-C(52)	-C(51)	106.(1)
C(49)	-C(50)	-C(51)	98.(1)				

-HYDROGEN- PARAMETERS:

O(4)	-C(49)	-H(491)	109.(1)	C(50)	-C(51)	-H(511)	107.(2)
O(4)	-C(49)	-H(492)	109.(1)	C(50)	-C(51)	-H(512)	108.(2)
C(50)	-C(49)	-H(491)	109.(2)	C(52)	-C(51)	-H(511)	107.(2)
C(50)	-C(49)	-H(492)	108.(2)	C(52)	-C(51)	-H(512)	108.(2)
H(491)	-C(49)	-H(492)	109.(2)	H(511)	-C(51)	-H(512)	110.(2)
C(49)	-C(50)	-H(501)	114.(2)	O(4)	-C(52)	-H(521)	111.(2)
C(49)	-C(50)	-H(502)	113.(2)	O(4)	-C(52)	-H(522)	110.(1)
C(51)	-C(50)	-H(501)	111.(2)	C(51)	-C(52)	-H(521)	111.(2)
C(51)	-C(50)	-H(502)	111.(2)	C(51)	-C(52)	-H(522)	110.(2)
H(501)	-C(50)	-H(502)	109.(2)	H(521)	-C(52)	-H(522)	110.(2)

TABLE V. TORSION ANGLES (DEG.) FOR: CP055 P-1 M.B00Y.

C(50)	-C(49)	-O(4)	-C(52)	-22.(2)	C(50)	-C(51)	-C(52)	-O(4)	3.(2)
O(4)	-C(49)	-C(50)	-C(51)	22.(1)	C(51)	-C(52)	-O(4)	-C(49)	10.(2)
C(49)	-C(50)	-C(51)	-C(52)	-16.(2)					

-HYDROGEN- PARAMETERS:

H(491)	-C(49)	-O(4)	-C(52)	99.(2)	H(501)	-C(50)	-C(51)	-H(512)	101.(2)
H(492)	-C(49)	-O(4)	-C(52)	-141.(1)	H(502)	-C(50)	-C(51)	-C(52)	102.(2)
O(4)	-C(49)	-C(50)	-H(501)	140.(2)	H(502)	-C(50)	-C(51)	-H(511)	-138.(2)
O(4)	-C(49)	-C(50)	-H(502)	-95.(2)	H(502)	-C(50)	-C(51)	-H(512)	-20.(2)
H(491)	-C(49)	-C(50)	-C(51)	-99.(2)	C(50)	-C(51)	-C(52)	-H(521)	123.(2)
H(491)	-C(49)	-C(50)	-H(501)	19.(2)	C(50)	-C(51)	-C(52)	-H(522)	-116.(2)
H(491)	-C(49)	-C(50)	-H(502)	144.(2)	H(511)	-C(51)	-C(52)	-O(4)	-116.(2)
H(492)	-C(49)	-C(50)	-C(51)	142.(1)	H(511)	-C(51)	-C(52)	-H(521)	4.(2)
H(492)	-C(49)	-C(50)	-H(501)	-100.(2)	H(511)	-C(51)	-C(52)	-H(522)	125.(2)
H(492)	-C(49)	-C(50)	-H(502)	25.(2)	H(512)	-C(51)	-C(52)	-O(4)	126.(2)
C(49)	-C(50)	-C(51)	-H(511)	103.(2)	H(512)	-C(51)	-C(52)	-H(521)	-114.(2)
C(49)	-C(50)	-C(51)	-H(512)	-139.(2)	H(512)	-C(51)	-C(52)	-H(522)	7.(2)
H(501)	-C(50)	-C(51)	-C(52)	-136.(2)	H(521)	-C(52)	-O(4)	-C(49)	-110.(2)
H(501)	-C(50)	-C(51)	-H(511)	-17.(2)	H(522)	-C(52)	-O(4)	-C(49)	128.(2)